

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO SISTEMAS DE PROCESSOS
QUÍMICOS E INFORMÁTICA

CONTROLE DE REATORES DE BATELADA EXOTÉRMICOS PELO MÉTODO
DA LINEARIZAÇÃO GLOBAL

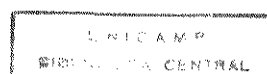
AUTOR: Luís Emílio Vasconcelos de/Andrade ²⁴

ORIENTADOR: Prof. Dr. Mário de Jesus/Mendes ^t

Tese apresentada à Faculdade de Engenharia
Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do
título de mestre em Engenharia Química.

setembro/1993

Campinas - SP



UNIDADE	BC
EX. Nº	Am 24C
CLASSE	20054
DATA	26/1/93
VALOR	[x]
PREÇO CRP	800,00
DATA	17/11/93
Nº CPD	

FICHA CATALOGRAFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA CENTRAL - UNICAMP

CM-00052433-4

Andrade, Luis Emilio Vasconcelos de

Controle de reatores de batelada exotermicos pelo metodo da linearizacao global / Luis Emilio Vasconcelos de Andrade. -- Campinas, SP : [s.n.], 1993.

Orientador : Mario de Jesus Mendes.

Dissertacao (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Quimica.

1. Controle de processos. 2. Projeto e controle de processos.
I. Mendes, Mario de Jesus. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Quimica. 1. Titulo.

20. CDD -660.281 5

-660.281 2

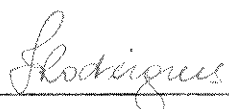
Indices para Catalogo Sistematico:

1. Controle de processos 660.281 5
2. Projeto e controle de processos 660.281 2

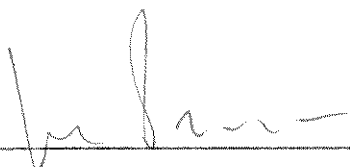
Esta versão corresponde a redação final da Tese de Mestrado, defendida pelo Eng.º Luís Emílio Vasconcelos de Andrade, e aprovada pela Comissão Julgadora em 10/9/83.



Tese defendida e aprovada, em 10 de setembro de 1993, pela
banca examinadora constituída pelos professores:



Prof. Dra. Maria Teresa Moreira Rodrigues



Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira



Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes

Dedico

este trabalho às pessoas que mais amo; meus pais, Luiz e Sônia, e meus irmãos, Luís Gustavo, Otávio, e Luciana.

Agradeço

ao Professor Doutor Mário de Jesus Mendes

ao Departamento de Sistema de Processos Químicos

ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e
Tecnológico, CNPq

e àqueles que, embora não mencionados aqui, contribuíram
de alguma maneira para a realização deste trabalho.

RESUMO

Os reatores em batelada representam um tipo de processo de grande importância na indústria química, visto que estão associados à produção de uma variada quantidade de produtos, tais como as especialidades químicas e fármacos. O satisfatório controle deste processo, visando assegurar a qualidade do produto final, põe-se como uma questão bastante particular. Como muitas das reações promovidas em reatores em batelada envolvem liberação de calor, tem-se configurado, para efeito de controle, um processo não-linear que não possui um estado estacionário de operação (em torno do qual uma linearização por expansão em série de Taylor poderia ser feita).

Uma estratégia de controle de processos recentemente desenvolvida cuja aplicação em processos não-lineares e transientes apresenta uma metodologia de obtenção da lei de controle bem definida é o chamado Controle por Linearização Global (GLC). O emprego da estratégia de controle GLC objetivando controlar um reator em batelada exotérmico de cinética desconhecida, de modo que a temperatura do meio reacional siga o mais próximo possível uma trajetória pré-determinada, com todas as dificuldades associadas a este tipo de processo, é o objeto de estudo deste trabalho.

CAPÍTULO 1 - Introdução.....	1
CAPÍTULO 2 - Revisão Bibliográfica.....	4
2.1 Introdução.....	5
2.2 Estratégias de Controle de Reatores em Batelada Exotérmicos.....	8
2.2.1 Método GLC de Controle de Processos Não-Lineares.....	10
2.2.1.1 Exemplo de Aplicação do Método GLC no Controle de um Reator em Batelada Exotérmico.....	17
CAPÍTULO 3 - Modelagem do Reator em Batelada Exotérmico.	27
3.1 Introdução.....	28
3.2 Descrição da Operação do Reator em Batelada Exotérmico.....	29
3.3 Modelagem Matemática do Processo.....	30
3.3.1 Modelagem do Equipamento.....	30
3.3.1.1 Taxa de Calor Cedido ao Meio Reacional pela Camisa de Vapor (Q_{aq})	31
3.3.1.2 Taxa de Calor Retirado do Meio Reacional pela Serpentina de Refrigeração (Q_{res}).....	32

3.3.2	Modelagem da Cinética de Reação do Processo..	35
3.3.2.1	Trajectoria Ótima para a Temperatura do Meio Reacional ao Longo da Operação do Reator.....	37
3.4	Simulação Numérica da Operação do Reator.....	40
3.4.1	Algoritmo de Solução das Equações Diferenciais do Processo.....	41
CAPÍTULO 4 - Desenvolvimento da Estratégia de Controle do Reator em Batelada Exotérmico.....		44
4.1	Introdução.....	45
4.2	Modelagem do Reator para o Projeto da Malha de Controle.....	46
4.2.1	Estimativa da Temperatura da Camisa de Vapor.	47
4.2.2	Estimativa da Temperatura do Fluido Refrigerante na Saída da Serpentina (T_{cf})....	48
4.2.3	Estimativa da Taxa do Calor de Reação (Q_r)...	48
4.3	Desenvolvimento da Estratégia de Controle GLC Aplicada ao Reator em Batelada Exotérmico.....	49
4.3.1	Desenvolvimento da Lei de Realimentação Definida pelo Método GLC para a Etapa de Aquecimento do Reator.....	50
4.3.2	Desenvolvimento da Lei de Realimentação Definida pelo Método GLC para a Etapa de Resfriamento do Reator.....	53

4.4	Representação das Malhas de Controle GLC para as Etapas de Aquecimento e Resfriamento do Reator.....	55
CAPÍTULO 5 - Simulação do Controle do Reator em Batelada Exotérmico.....		58
5.1	Introdução.....	59
5.2	Sintonização dos Controladores Lineares das Malhas GLC pelo Método da Síntese Direta.....	60
5.2.1	Projeto do Controlador Linear da Malha GLC da Etapa de Aquecimento do Reator.....	62
5.2.2	Projeto do Controlador Linear da Malha GLC da Etapa de Resfriamento do Reator.....	63
5.3	Desempenho das Malhas.....	63
5.3.1	Critérios Adotados para Avaliar o Desempenho das Malhas de Controle GLC.....	64
5.4	Simulação do Controle de Temperatura do Reator.....	66
5.4.1	Controle de Temperatura do Reator na Etapa de Aquecimento.....	66
5.4.1.1	Descrição dos Sistemas Considerados para Representar a Dinâmica do Processo.....	66
5.4.1.2	Pré-Sintonização da Malha de Controle GLC pelo Método da Síntese Direta, Para os 4 Conjuntos de Parâmetros.....	67

5.4.1.3	Estimativa da Taxa do Calor de Reação e da Temperatura da Parede da Camisa de Vapor.....	71
5.4.1.4	Análise do Desempenho das Malhas GLC	74
5.4.1.5	Respostas Ótimas das 4 Malhas GLC na Etapa de Aquecimento.....	79
5.4.2	Controle de Temperatura do Reator na Etapa de Resfriamento.....	81
5.4.2.1	Descrição dos Sistemas Considerados para Representar a Dinâmica do Processo.....	81
5.4.2.2	Pré-Sintonização da Malha de Controle GLC pelo Método da Síntese Direta, Para os 4 Conjuntos de Parâmetros.....	82
5.4.2.3	Estimativa da Taxa do Calor de Reação e da Temperatura da Parede da Camisa de Vapor.....	85
5.4.2.4	Análise do Desempenho das Malhas GLC	88
5.4.3	Controle Ótimo de Temperatura do Reator para Toda a Operação de Batelada.....	96
5.4.3.1	Controle Ótimo de Temperatura do Reator para Toda a Operação de Batelada para uma Concentração Inicial do Reagente A de 4 Kg/mol/m^3 .	99

CAPÍTULO 6 - Discussão dos Resultados e Conclusão.....	102
ANEXO.....	107
NOMENCLATURA.....	110
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	116

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

Os processos em batelada representam uma importante área na indústria de processos químicos. Flexibilidade e rápida resposta a mudanças de condições de mercado podem ser citadas como sendo as principais vantagens dos processos descontínuos. O interesse por parte das indústrias pela produção de compostos químicos em quantidades reduzidas, porém com elevado valor agregado, resultou em um acentuado crescimento de importância dos processos químicos em batelada - fato verificado nas últimas décadas [1]. Diferentemente dos processos contínuos de produção de "commodities" químicos, os processos em batelada são caracterizados por ambientes de produção e comportamento dinâmico distintos. Os variados ambientes de produção de espécies químicas em tais processos requerem mudanças freqüentes de reagentes químicos, trajetória de "setpoints" e em parâmetros de sintonização dos controladores utilizados nas malhas de controle [2,3].

Os processos em batelada, dada a sua relevância, devem ser conduzidos da forma mais eficiente possível, combinando elevada qualidade com maximização de produção. Para que estes propósitos sejam alcançados, no entanto, torna-se conveniente a adoção de alguma estratégia de controle do processo, ao invés de deixá-lo ser operado manualmente.

O controle de processos em batelada apresenta-se com aspectos próprios. Enquanto os processos contínuos operam em torno de um determinado estado estacionário, o mesmo não ocorre com aqueles em batelada. E, por assim serem, os processos em batelada não podem

ser expressos por uma função de transferência típica relacionando as variáveis manipulada e controlada, com parâmetros como, por exemplo, ganho, constante de tempo, e fator de amortecimento, fixos, como acontece nos modelos dinâmicos lineares de processos contínuos, expressos em termos de variáveis desvios.

O presente trabalho deteve-se no estudo do controle de um processo em batelada específico, que são os Reatores em Batelada Exotérmicos, fazendo-se uso de uma estratégia de controle recentemente desenvolvida, o chamado Controle Globalmente Linearizado (GLC).

A estratégia GLC apresenta-se com características que a tornam bastante atraente para o emprego no controle de reatores exotérmicos em batelada, que são a inexistência da necessidade de um estado estacionário de referência de operação, e a obtenção de uma linearização exata do modelo do processo.

CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 - INTRODUÇÃO

Existe, do ponto de vista da Engenharia Química, uma dicotomia quanto ao tipo de problemas envolvidos no controle dos processos em batelada. Estes são: a) Problemas de otimização de rendimento; ou, b) Problemas de controle da qualidade do produto. Os problemas do primeiro tipo estão associados às áreas de processos químicos cujas tecnologias já são satisfatoriamente dominadas, representando o custo de produção significativa parcela do preço final do produto. Produtos petroquímicos e fármacos genéricos são exemplos de produtos que envolvem na sua fabricação problemas de otimização de rendimento. A representação matemática para o comportamento dinâmico de processos associados a problemas de otimização de rendimento é da forma:

Dado um processo químico em batelada descrito por:

$$\dot{x} = f(x, u, t) \quad (2.1)$$

$$y = \phi [x(t_f)] \quad (2.2)$$

com $0 \leq t \leq t_f$. Para ele deve-se encontrar uma lei de controle capaz de proporcionar rendimento, neste caso, também variável controlada do processo, máximo. Vê-se que um aspecto próprio deste tipo de problema é o fato da variável controlada não ser função do tempo, mas tão somente um valor no instante final de operação do processo.

Os problemas de controle da qualidade do produto são

especialmente importantes em processos que envolvam novas tecnologias, como por exemplo na produção de especialidades químicas e novos fármacos. Para estes produtos o custo de produção significa uma pequena parcela do seu preço final de venda, e os mesmos possuem rígidas especificações de qualidade. Rejeitar toda uma batelada por não apresentar o produto as propriedades requeridas implica em considerável prejuízo, visto que as produções se dão em pequena escala e o preço do produto é relativamente elevado. Embora para os processos de tecnologias bem dominadas a qualidade do produto também seja importante, em geral, esta não é fundamental, pois as especificações do produto não são assim tão rigorosas. Problemas de controle da qualidade do produto estão normalmente associados à obediência de uma "receita" específica para um dado produto, e podem, desta maneira geral, ser representados da seguinte forma:

Seja um processo químico em batelada descrito por:

$$\dot{x} = f(x,u) \quad (2.3)$$

$$y = h(x) \quad (2.4)$$

O objetivo neste caso é encontrar uma lei de controle que permita à variável controlada acompanhar a trajetória desejada, isto é, a trajetória do "setpoint". Contudo, a existência de erros de modelagem, bem como de perturbações no processo implicam, em geral, na obtenção de uma trajetória sub-ótima, tanto menos próxima da ideal quanto mais significativos forem aqueles erros.

O processo em batelada que é objeto de estudo deste trabalho são os Reatores em Batelada Exotérmicos. Na operação destes reatores são três as etapas envolvidas, na sequência: 1) Etapa de Partida, na qual o conteúdo do reator é aquecido da temperatura ambiente àquela necessária para que ocorra reação; 2) Etapa de Reação, na qual a temperatura do meio reacional deve seguir a trajetória do "setpoint", que pode ser constante ou variável; 3) Etapa de Parada, onde o meio reacional é conduzido da temperatura em que se encontra ao final da etapa anterior à temperatura ambiente. Existindo todas estas etapas na operação do reator, e sendo a temperatura, em geral, uma variável de simples medição, opta-se freqüentemente pela temperatura do meio reacional para ser a variável controlada do processo.

O controle da temperatura do meio reacional na operação de reatores em batelada exotérmicos é um problema do tipo servo-controle, pois a variável controlada deve seguir uma trajetória pré-determinada ao longo do tempo. A trajetória ótima para a temperatura pode ser obtida por experiências laboratoriais, acúmulo de informações na realização das corridas industriais, ou mesmo pela determinação numérica da trajetória ótima com o auxílio do computador, dispondo-se do modelo cinético do processo. A determinação numérica da trajetória ótima a ser seguida pela variável controlada requer acentuado esforço computacional quando se trata de modelos de processos não-lineares, o que limita, assim sua utilização [4].

Conhecida a trajetória ótima a ser seguida pela temperatura do

meio reacional para o reator em batelada exotérmico, surge a questão de como fazer com que a temperatura real do reator siga a trajetória desejada o mais próximo possível. Trata-se de um problema de projeto do sistema de controle. Os reatores em batelada exotérmicos são processos tipicamente não-lineares, além de não apresentarem um estado estacionário de operação. Logo, estes processos não podem ser representados por uma função de transferência típica (como mencionado anteriormente). Assim, o projeto de controladores lineares, seguindo-se os conhecidos métodos de sintonização, não é possível, e com isso exigem o recurso a técnicas de controle mais complexas.

2.2 - ESTRATÉGIAS DE CONTROLE DE REATORES EM BATELADA EXOTÉRMICOS

São numerosos os autores que se dedicaram no desenvolvimento de novas e eficientes estratégias de controle de reatores em batelada exotérmicos. Em 1984 Jutan e Uppal [4] publicaram os resultados de seu trabalho no qual estudavam o desempenho de uma estrutura de controle "feedforward/feedback" não-linear para controlar a temperatura de um reator em batelada exotérmico de cinética desconhecida. O calor de reação nesta estratégia é considerado como sendo a variável perturbadora da malha de controle do processo, e seu valor é estimado pela equação do balanço de energia no reator, para cada instante de atuação do controlador digital. Partindo desta mesma estratégia de controle

"feed-forward/feedback", César [5] simula o controle de um reator em batelada exotérmico mais complexo. E deixa exposto em seu trabalho o desempenho bastante satisfatório da estratégia no controle do processo químico em questão. Ainda em seu trabalho, César faz a apresentação de algumas estratégias propostas na literatura para o controle de reatores em batelada exotérmicos. São citadas por ele: o Controle Cascata não-Linear, desenvolvido por Marroquin e Luyben [6,7]; e o Controle Adaptativo [8,9].

Tendo por ferramenta matemática a Geometria Diferencial, variadas estratégias de controle vem sendo desenvolvidas visando a aplicação em processos não-lineares. Um exemplo de tal tipo de estratégia é o Controle Globalmente Linearizado (ou GLC). Desenvolvida por Kravaris e Chung [10], esta estratégia de controle encontra-se fundamentada, inicialmente, em uma linearização exata do modelo do processo. Ela é conseguida pela imposição, ao processo, de uma lei de controle não-linear, função das variáveis de estado do mesmo. Esta linearização permite ao processo ser representado por uma função de transferência típica, com parâmetros fixos. Após ser definida a lei de controle não-linear, tem-se completada a malha GLC com o projeto de uma malha do tipo "feedback" conhecida do Controle Clássico.

No desenvolvimento deste trabalho, o controle de temperatura do reator em batelada exotérmico é feito empregando-se como estratégia de controle não-linear o método GLC.

2.2.1 - MÉTODO GLC DE CONTROLE DE PROCESSOS NÃO-LINEARES

A estratégia de controle GLC foi desenvolvida por Kravaris e Chung [10] tomando-se por base qualquer processo químico não-linear, com uma única variável controlada, e apenas uma variável manipulada (isto é, um processo SISO), contínuo no tempo, e cuja representação de estado pode ser colocada na forma:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) + g_1(x_1, x_2, \dots, x_n) u \\ \dot{x}_2 = f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) + g_2(x_1, x_2, \dots, x_n) u \\ \vdots \\ \dot{x}_n = f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) + g_n(x_1, x_2, \dots, x_n) u \\ y = h(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{cases} \quad (2.5)$$

onde x_1, x_2, \dots, x_n são as variáveis de estado, u é a variável manipulada, e y a variável controlada, do processo. Sob uma forma mais compacta, o sistema de equações (2.5) pode ser representado por:

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x) + g(x) u \\ y = h(x) \end{cases} \quad (2.6)$$

Felizmente a maioria dos processos químicos podem ser modelados pelas equações (2.6), como afirma Kravaris, permitindo assim à estratégia GLC um amplo emprego no controle de processos não-lineares.

A primeira etapa a ser realizada para a aplicação do método GLC, no controle de um processo cujo modelo dinâmico é representado pelas equações (2.6), é a obtenção de uma lei de controle não-linear, do tipo:

$$u = p(x) + q(x) v \quad (2.7)$$

onde $p(x)$ e $q(x)$ são funções das variáveis de estado do processo, e v é uma variável manipulada fictícia criada pelo método GLC. A lei de controle dada pela equação (2.7) deve ser capaz de conferir uma relação linear entre as variáveis y (controlada) e v (manipulada).

A dinâmica do processo, modelado segundo as equações (2.6), quando sobre ele age a lei de controle não-linear dada pela equação (2.7), é a seguinte:

$$\begin{cases} \dot{x} = [f(x) + g(x) p(x)] + g(x) q(x) v \\ y = h(x) \end{cases} \quad (2.8)$$

A ação da lei de controle não-linear dada pela equação (2.7) sobre o processo pode ser entendida pela Figura 2.1.

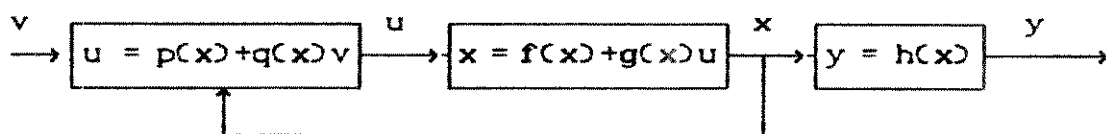


FIGURA 2.1 - Diagrama de Blocos da Linearização do modelo do processo feita pelo método GLC.

O diagrama de blocos representado na Figura 2.1 apresenta características bastante próprias. Nele vê-se que a variável v , criada pelo método, pode ser interpretada como sendo uma variável de referência ("setpoint") da variável controlada do processo. Outro aspecto a ser mencionado é o fato dos valores das variáveis de estado do processo serem realimentados, para assim definirem o valor da variável manipulada u . Por este motivo a lei de controle não-linear que determina o valor da variável manipulada u a cada instante de ação de controle é também chamada de lei de controle "feedback" das variáveis de estado do processo.

Kravaris e Chung mostram que nos casos em que a lei de controle não-linear (2.7) é expressa pela equação:

$$u = \psi(x, v) = \frac{v - \sum_{k=0}^r \beta_k L_f^k[h(x)]}{\beta_r L_g L_f^{r-1}[h(x)]} \quad (2.9)$$

onde a definição das derivadas de Lie $L_f^k[h(x)]$ e $L_g L_f^{r-1}[h(x)]$ é dada no Anexo, as variáveis v (entrada) e y (saída) passam a relacionarem-se por um modelo linear.

Na lei de controle definida na equação (2.9) r é a ordem relativa do processo. Para os processos lineares seu valor é calculado pela diferença entre o número de polos e o número de zeros de sua função de transferência. Raciocínio análogo não poderia ser feito para os processos não-lineares, pois estes sequer possuem uma função de transferência capaz de descrevê-los.

Porém, como é sabido, a ordem relativa de um processo é uma medida de quão direto é o efeito da variável manipulada sobre aquela controlada, independentemente de ser ele linear ou não. Em processos não-lineares a ordem relativa é definida pelo menor número inteiro positivo para o qual a seguinte equação é válida [11]:

$$L_g L_f^{r-1}[h(x)] \neq 0 \quad (2.10)$$

Conhecida a ordem relativa do processo não-linear, e a ele impondo a lei de controle descrita pela equação (2.9), as variáveis y e v passam a se relacionar, no domínio do tempo, segundo a equação:

$$\sum_{k=0}^r \beta_k \frac{d^k y}{dt^k} = v \quad (2.11)$$

Se a equação acima for colocada no domínio de Laplace, as variáveis y e v são relacionadas pela seguinte função de transferência:

$$\frac{y(s)}{v(s)} = \frac{1}{\beta_r s^r + \beta_{r-1} s^{r-1} + \dots + \beta_1 s + \beta_0} \quad (2.12)$$

A equação (2.12) pode ser entendida como sendo uma função de transferência fictícia do processo, pois relaciona a variável controlada (y) e a variável v criada pelo método.

Vê-se pela equação (2.11), ou (2.12), que o processo fictício, linearizado no sentido entrada/saída, tem a mesma ordem relativa que o processo real. Mais ainda, o número de polos do processo linearizado é igual a sua ordem relativa, uma vez que a função de transferência a ele correspondente não possui zeros. Processos não-lineares não possuem zeros como um conjunto de números, como acontece com os processos lineares. Possuem, porém, em sua dinâmica, informações equivalentes àquelas contidas nos zeros dos processos lineares. Ao ser linearizado no sentido entrada/saída o processo não-linear tem cancelada estas informações associadas a dinâmica de seus zeros, já que o processo linearizado não contém zeros. Logo, para que o processo linearizado seja estável, independentemente da escolha feita para os parâmetros ajustáveis β 's, deve o processo não-linear que o deu origem ser de fase mínima [12].

A lei de controle não-linear descrita pela equação (2.9) não é provida de ação integral. Desta maneira ela não seria capaz de evitar a ocorrência de "offset". Existe, contudo, a possibilidade de, considerando a função de transferência envolvendo as variáveis y e v como sendo a de um processo fictício, se contornar aquele problema. Basta, para que isto ocorra, que seja projetada uma malha de controle "feedback" clássica com um controlador linear do tipo PI ou PID para

controlar aquele processo linearizado. É exatamente a malha de controle resultante deste procedimento que define a estrutura de controle GLC, representada na Figura 2.2.

Ao se analisar a lei de controle que lineariza o processo não-linear, equação (2.9), vê-se que ela é função das variáveis de estado. Entretanto, na prática, a medição direta destas variáveis nem sempre é possível. E mesmo que fosse, tal procedimento seria, na maioria das vezes, economicamente inviável.

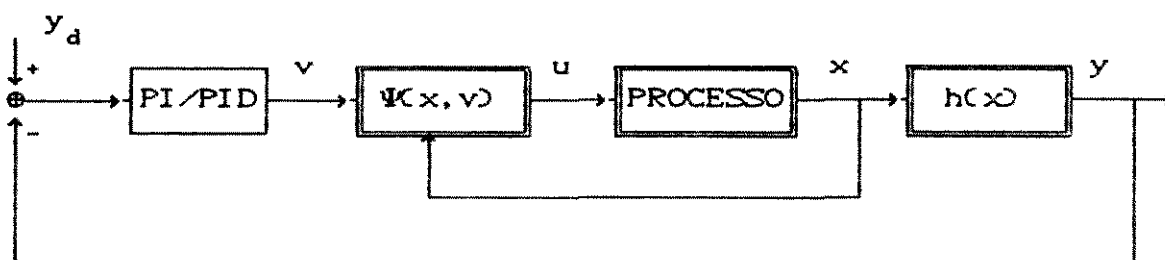


FIGURA 2.2 - Estrutura da malha de Controle Globalmente Linearizado (GLC).

A estimativa das variáveis de estado que não puderem ser medidas diretamente é feita pela solução das equações diferenciais que descrevem a dinâmica do processo, com o auxílio de um computador que recebe em tempo real os sinais medidos das variáveis manipulada e controlada durante a operação. Este computador assim empregado recebe a denominação de observador de estado.

Os observadores de estado classificam-se em observadores de

estado em malha aberta e observadores de estado em malha fechada. Os observadores de estado em malha aberta estimam as variáveis de estado do processo resolvendo o seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\dot{\hat{x}} = f(\hat{x}) + g(\hat{x}) u \quad (2.13)$$

com $\hat{x}(0) = x_0$.

A ordem do observador de estado, isto é, o número de equações diferenciais que descrevem a dinâmica do processo a serem resolvidas pelo computador, pode ser reduzida em uma unidade. Para que isto ocorra, contudo, é necessário que o computador receba os valores medidos da variável controlada ao longo da operação do processo. Assim, uma das variáveis de estado pode ser explicitada em função da variável controlada, como mostra a equação:

$$x_k = H(y, x_1, x_2, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_n) \quad (2.14)$$

Mediante substituição do valor de x_k , definido na equação (2.14), no sistema de equações diferenciais dado pela equação (2.13), tem-se o observador de estado de ordem reduzida descrito pelas seguintes equações:

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}}_m = & f_m(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{k-1}, H, \hat{x}_{k+1}, \dots, \hat{x}_n) + g_m(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_{k-1}, H, \\ & \hat{x}_{k+1}, \dots, \hat{x}_n) u \end{aligned} \quad (2.15)$$

com $\hat{x}_m(0) = x_{m,0}$.

Os observadores de estado de malha aberta não devem ser utilizados em processos instáveis em malha aberta, ou naqueles que possuam dinâmica muito lenta, onde erros nos valores iniciais das variáveis do processo propagam-se por muito tempo na estimativa das mesmas. Os observadores de estado de malha fechada são recomendáveis para estes casos. Infelizmente, porém, poucos são os trabalhos disponíveis na literatura a respeito de tal tipo de observadores de estado [13,14,15,16].

2.2.1.1 - EXEMPLO DE APLICAÇÃO DO MÉTODO GLC NO CONTROLE DE UM REATOR EM BATELADA EXOTÉRMICO

Kravaris e Chung [10] aplicaram o método de controle GLC para o controle de um reator em batelada exotérmico, de forma a fazer com que a temperatura do meio reacional siga uma trajetória ótima previamente conhecida. Embora o exemplo de reator por eles considerado careça de considerações mais realistas, houve interesse, na fase inicial deste trabalho, em estudá-lo. Deste primeiro contato com o método GLC aplicado a um exemplo de processo torna-se possível a identificação de aspectos vantajosos, ou limitantes inerentes a sua utilização como estratégia de controle de processos.

A seguir será apresentado o mesmo exemplo considerado por Kravaris e Chung, com os resultados da simulação aqui obtidos

empregando-se o método GLC de controle.

No interior do reator ocorrem as seguintes reações:



A reação $A \longrightarrow B$ é de cinética de segunda ordem, enquanto que a reação $B \longrightarrow C$ é de cinética de primeira ordem. As equações de balanço material, são deste modo, dadas por:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1(T) C_A^2, \quad C_A(0) = 1 \quad (2.16)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1(T) C_A^2 - k_2(T) C_B, \quad C_B(0) = 0 \quad (2.17)$$

com,

$$k_1(T) = A_{10} \exp [-E_1/(R(T+273,15))] \quad (2.18)$$

$$k_2(T) = A_{20} \exp [-E_2/(R(T+273,15))] \quad (2.19)$$

O reator é equipado tanto com camisa de vapor, como com serpentina de refrigeração. Isto é feito para que a temperatura do meio reacional, variável controlada, possa acompanhar a trajetória desejada convenientemente. As variáveis manipuladas do processo

são a temperatura do vapor na camisa de aquecimento (T_s) e o coeficiente global de transferência de calor entre o fluido refrigerante que escoa no interior da serpentina de resfriamento e o meio reacional (U_c). Neste caso o problema apresenta-se com duas variáveis manipuladas e uma única a variável controlada. Jutan e Uppal [4] mostram como pode-se contornar o problema com a criação de uma variável manipulada paramétrica u , que pondere a ação das duas variáveis manipuladas, segundo as equações:

$$T_s = (T_{s,max} - T_{s,min}) u + T_{s,min} \quad (2.20)$$

$$U_c = (U_{c,min} - U_{c,max}) u + U_{c,max} \quad (2.21)$$

com $0 \leq u \leq 1$. Assim, quando u for igual a zero, tem-se resfriamento máximo, e aquecimento mínimo. E para u igual a um, o resfriamento é mínimo, e o aquecimento máximo.

O balanço de energia no reator é dado por:

$$\frac{dT}{dt} = \gamma_1 k_1(T) C_A^2 + \gamma_2 k_2(T) C_B + (a_1 + a_2 T) + (b_1 + b_2 T) u \quad (2.22)$$

onde,

$$\gamma_1 = (-\Delta H_1) / (\rho C_p) \quad (2.23)$$

$$\gamma_2 = (-\Delta H_2)/(\rho C_p) \quad (2.24)$$

$$a_1 = (U_j A_j T_{e,min} + U_{c,max} A_c T_c)/(\rho V C_p) \quad (2.25)$$

$$a_2 = -(U_j A_j + U_{c,max} A_c)/(\rho V C_p) \quad (2.26)$$

$$b_1 = [U_j A_j (T_{e,max} - T_{e,min}) - (U_{c,max} - U_{c,min}) A_c T_c]/(\rho V C_p) \quad (2.27)$$

$$b_2 = (U_{c,max} - U_{c,min}) A_c /(\rho V C_p) \quad (2.28)$$

A trajetória ótima a ser seguida pela temperatura deste reator, para que a produção do componente B seja máxima, foi calculada por Ray e Szekely [17], e dada pela equação:

$$T_d(t) = 54 + 71 \exp(-2,5 \cdot 10^{-3} t) \quad (2.29)$$

Os parâmetros e correlações de projeto do reator são aqueles que aparecem na Tabela 2.1.

As variáveis de estado do processo são C_A , C_B e T . Elas definem o vetor $x = (C_A, C_B, T)$, e o escalar $y = T$.

TABELA 2.1 - Parâmetros do reator estudado por Kravaris e Chung [10].

$\rho = 1000$	$C_p = 1$	
$-\Delta H_1 = 4,18 \cdot 10^4$	$-\Delta H_2 = 8,36 \cdot 10^4$	
$(A_j/V) = 30$	$(A_c/V) = 17$	
$T_{s,max} = 150$	$T_{s,min} = 70$	$T_c = 25$
$U_{c,max} = 4,42$	$U_{c,min} = 1,39$	$U_j = 1,16$
$A_{10} = 1,1$	$A_{20} = 172,2$	
$E_1 = 2,09 \cdot 10^4$	$E_2 = 4,18 \cdot 10^4$	
tempo de batelada = 1 hora		

sendo,

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{4550 F_c^{0,8}} + \frac{1}{10,8}$$

(2.30)

Colocando-se as equações (2.16), (2.17) e (2.22) na forma do sistema de equações (2.6), resulta em:

$$f(x) = \begin{bmatrix} -k_1(T) C_A^2 \\ k_1(T) C_A^2 - k_2(T) C_B \\ \gamma_1 k_1(T) C_A^2 + \gamma_2 k_2(T) C_B + (a_1 + a_2 T) \end{bmatrix}$$

(2.31)

$$g(x) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ b_1 + b_2 T \end{bmatrix}$$

(2.32)

$$h(x) = T \quad (2.33)$$

A ordem relativa do processo, como foi dito anteriormente, deve ser o menor número inteiro positivo para o qual a equação (2.10) é verdadeira. Para que a ordem relativa do processo dado pelo reator em batelada exotérmico, cuja modelagem é feita acima, seja igual a um, é necessário que:

$$L_g h(x) \neq 0 \quad (2.34)$$

Sendo os vetores $f(x)$ e $g(x)$ descritos pelas equações (2.31) e (2.32), respectivamente, e o escalar $h(x)$ dado pela equação (2.33), tem-se que:

$$L_g h(x) = g_g = b_1 + b_2 T \quad (2.35)$$

Logo, a ordem relativa do reator em batelada exotérmico do exemplo é igual a um, pois a condição imposta na equação (2.34) é atendida.

A lei de controle não-linear capaz de linearizar a relação entre as variáveis y e v é expressa pela equação (2.9), com r igual a um, e pode ser assim definida:

$$u = \frac{v - \beta_0 h(x) - \beta_1 L_f h(x)}{\beta_1 L_g h(x)} \quad (2.36)$$

sendo,

$$L_f h(x) = f_g(x) = \gamma_1 k_1(T) C_A^2 + \gamma_2 k_2(T) C_B + (a_1 + a_2 T) \quad (2.37)$$

Com $h(x)$ e $L_f h(x)$ dados pelas equações (2.33) e (2.37), respectivamente, e $L_g h(x)$ expresso pela equação (2.35), a lei de controle não-linear que é apresentada na equação (2.36) toma a seguinte forma:

$$u = \frac{v - \beta_0 T - \beta_1 [\gamma_1 k_1(T) C_A^2 + \gamma_2 k_2(T) C_B + (a_1 + a_2 T)]}{\beta_1 (b_1 + b_2 T)} \quad (2.38)$$

A ação da lei de controle expressa pela equação (2.38) resulta na dinâmica envolvendo as variáveis controlada (T) e manipulada (v) definida pela equação (2.11), para r igual a um, e é assim equacionada:

$$\beta_1 \frac{dT}{dt} + \beta_0 T = v \quad (2.39)$$

Os parâmetros β_0 e β_1 escolhidos por Kravaris e Chung foram $\beta_0 = 1$ e $\beta_1 = 3600$ s. O controlador linear externo que completa a malha GLC foi do tipo PI, com $K_c = 100$ e $\tau_I = 3600$ s.

A simulação do comportamento do reator em batelada controlado

pela estrutura GLC, e com os parâmetros definidos acima é mostrada na Figura 2.3.

O exemplo de reator estudado acima, tal como foi apresentado, envolveu em sua modelagem algumas simplificações. A manipulação direta da temperatura do vapor ou do coeficiente global de transferência de calor não é possível na prática. Embora a maioria das reações que são promovidas em reatores em batelada tenha a sua cinética pouco compreendida, dada a sua freqüente complexidade, no exemplo considerado esta limitação não foi considerada, pois a

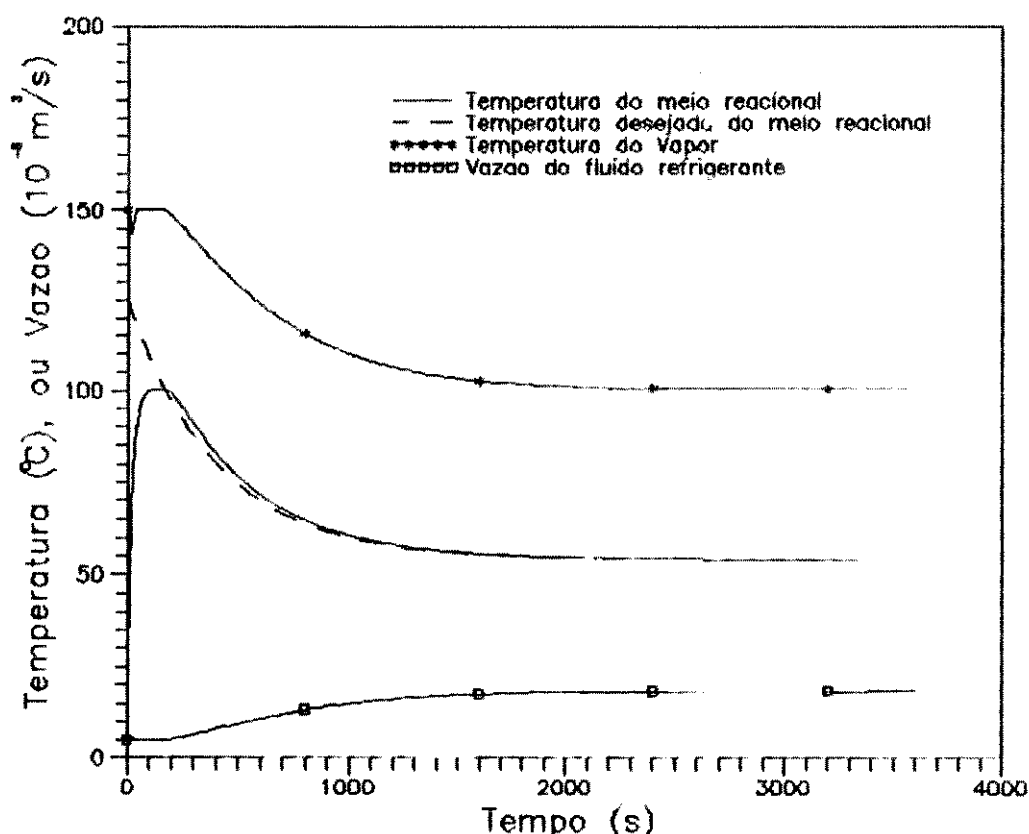


FIGURA 2.3 - Comportamento do reator controlado pela estratégia GLC estudado por Kravaris e Chung.

cinética das reações que ocorrem no interior do reator é suposta totalmente conhecida. Para o exemplo de reator que será objeto de estudo deste trabalho, no entanto, todas as informações associadas à cinética de reação serão consideradas desconhecidas, como é frequente nos casos industriais. Será possível apenas a estimativa da taxa do calor de reação ao longo da operação.

A trajetória real da temperatura do meio reacional, tal como é vista na Figura 2.3 para o exemplo de Kravaris e Chung, apresenta uma sobrelevação. Isto provavelmente foi resultado da saturação do controlador linear da malha GLC durante o aquecimento do meio reacional, pois a diferença entre o "setpoint" e o valor real da temperatura do meio é bastante grande naquela etapa. Alterar a trajetória do "setpoint" na etapa de aquecimento do reator para que seu valor seja igual a temperatura real na partida da operação e a taxa de aquecimento seja possível na prática pode ser um procedimento capaz de evitar a sobrelevação. Tendo então a temperatura do meio reacional atingido o valor definido pela trajetória de Ray e Szekely [17], em um determinado instante de operação, o resfriamento do reator passa a ser conduzido exatamente como determinam estes autores.

Os parâmetros β 's que aparecem no método de controle GLC determinam a dinâmica do processo linearizado, e influenciam na resposta da malha de controle. Pela escolha feita por Kravaris e Chung o processo linearizado foi definido com os seguintes parâmetros: constante de tempo (β_1/β_0) de 3600 s, e ganho ($1/\beta_0$) de 1. A opção por estes valores não foi justificada pelos autores,

acabando por motivar um estudo sobre a influência dos valores dos β 's na resposta da malha.

Ainda que com as simplificações feitas pelos autores no exemplo estudado acima, do ponto de vista do Controle de Processos, merece admiração a capacidade apresentada pela estratégia GLC em controlar um processo acentuadamente não-linear e transiente, como são os reatores em batelada exotérmicos, empregando-se um controlador com parâmetros fixos de sintonização.

O desenvolvimento deste trabalho tem como motivação um estudo mais criterioso do método de controle GLC, que se apresenta como uma opção a mais de estratégia de controle de reatores em batelada exotérmicos. A estratégia GLC torna-se ainda mais atraente quando abordada com base em técnicas de Controle Avançado, tais como: Controle "Feedforward" [18,19], Controle Multi-variável [20], e Controle por Compensação de Tempo Morto [21].

CAPÍTULO 3 - MODELAGEM DO REATOR EM BATELADA EXOTÉRMICO

3.1 - INTRODUÇÃO

No desenvolvimento deste trabalho faz-se uso de um poderoso recurso matemático, cada vez mais requisitado pela Engenharia Química no estudo de processos químicos - a Simulação Numérica. Quando empregada convenientemente, ela permite a obtenção de informações a respeito da evolução do processo químico ao longo do tempo de operação, sem que para isso seja necessária sua realização prática. A simulação de um processo químico qualquer envolve tão somente a solução numérica simultânea de todas as equações necessárias para descrever seu comportamento dinâmico. É-se de esperar, portanto (o que é verdadeiro) que quanto mais próximo do processo real estiver o modelo matemático que o represente, maior será a concordância entre os resultados fornecidos pela simulação e aqueles encontrados quando o mesmo processo vier a ser operado de fato.

O trabalho aqui apresentado simula numericamente o comportamento dinâmico de um reator em batelada exotérmico específico - o mesmo que foi objeto de estudo de César [5] para avaliar a estratégia de controle "feedforward/feedback" proposta por Jutan e Uppal [4] - quando a ele é imposto o Controle Globalmente Linearizado (GLC). O objetivo do controle deste reator é permitir à temperatura do meio reacional seguir, tão próximo quanto possível, uma trajetória ótima previamente determinada.

3.2 - DESCRIÇÃO DA OPERAÇÃO DO REATOR EM BATELADA EXOTÉRMICO

O processo considerado neste estudo de simulação é definido por um reator do tipo batelada. Estando este reator carregado com a massa reacional, e devidamente selado, seu conteúdo é aquecido, por intermédio de uma camisa de vapor que o envolve, para que seja atingida a temperatura necessária ao processamento da reação. O vapor condensado na camisa é eliminado mediante purga. No interior do reator existe uma serpentina de refrigeração, na qual circula o fluido refrigerante (água). O meio reacional é agitado continuamente, e a uma velocidade constante. Isto facilita as trocas térmicas entre o meio reacional e o vapor, bem como entre aquele e o fluido refrigerante. A agitação deixa também o meio reacional melhor homogeneizado, o que permite considerar o processo como um sistema de parâmetros concentrados, para efeitos de modelagem.

A taxa de aquecimento do meio reacional é controlada manipulando-se a temperatura do vapor no interior da camisa, por estar-se considerando o equilíbrio entre a pressão e a temperatura do vapor. A taxa de refrigeração é controlada pela vazão do fluido refrigerante que escoar no interior da serpentina. Sendo assim, o meio reacional passará por uma etapa inicial de aquecimento e uma seguinte de refrigeração. Em ambas as etapas a variável controlada do processo é a temperatura do meio reacional.

3.3 - MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROCESSO

A apresentação da modelagem do reator em batelada feita adiante divide-se em duas partes. Primeiramente será exposta a modelagem do equipamento, isto é, do reator propriamente dito. Serão considerados os balanços energéticos que envolvem as trocas térmicas do meio reacional com a camisa de vapor e com a serpentina de refrigeração. A outra etapa da modelagem descreve as reações específicas que ocorrem no interior do reator. Elas são equacionadas pelos balanços materiais de conversão de reagentes em produtos, e ainda pela taxa de geração de energia associada às reações.

3.3.1 - MODELAGEM DO EQUIPAMENTO

O balanço energético envolvendo todas as taxas de troca térmica e a de geração de energia, para a massa reacional pode ser expresso pela equação:

$$(\rho V C_p) \frac{dT}{dt} = (Q_{aq.} - Q_{res.}) + Q_r \quad (3.1)$$

Assim, a taxa de variação de energia da massa reacional ao longo do tempo é igual a diferença entre a taxa de calor a ela fornecida pela camisa de vapor ($Q_{aq.}$) e a taxa de calor dela retirada pela serpentina de refrigeração ($Q_{res.}$), somada à taxa de calor gerado

pela reação (Q_r).

Na modelagem do equipamento são analisadas as taxas de transferência de calor $Q_{aq.}$ e $Q_{res.}$ com o meio reacional. Visto que a taxa de calor gerado no meio reacional é função da taxa de reação, independentemente da configuração do reator, seu estudo será feito adiante, juntamente com a modelagem da cinética de reação.

3.3.1.1 - TAXA DE CALOR CEDIDO AO MEIO REACIONAL PELA CAMISA DE VAPOR ($Q_{aq.}$)

O aquecimento do meio reacional é promovido da seguinte forma: O vapor admitido no interior da camisa transfere, por convecção, calor para a parede, que está também em contato com o meio reacional. Parte do calor absorvido pela parede da camisa é, também por convecção, cedida à massa reacional. A outra parte deste fica retida pela parede, resultando na elevação de sua temperatura.

A taxa de calor cedido pelo vapor à parede da camisa é expressa por:

$$Q_v = h_{jo} A_{jo} (T_s - T_j) \quad (3.2)$$

A taxa de calor fornecido pela parede da camisa para o meio reacional, na hipótese simplificadora de não haver gradiente de temperatura nesta parede, fica sendo expressa por:

$$Q_{aq.} = h_j A_j (T_j - T) \quad (3.3)$$

Os coeficientes de transferência de calor h_{jo} e h_j , que aparecem nas equações (3.2) e (3.3), são função de propriedades físicas dos fluidos que estão em contato com a parede (como condutividade térmica, capacidade calorífica e viscosidade), que são o vapor e a massa reacional, bem como de características do equipamento, como a geometria da superfície de troca térmica e velocidade de agitação, ou escoamento, dos fluidos. Como o exemplo do modelo do reator considerado aqui é o mesmo levado em conta por César [5], todos os parâmetros de projeto do equipamento serão os mesmos por ele definidos.

Uma vez que a parede da camisa de vapor impõe resistência à transferência de calor do vapor para o meio reacional, torna-se necessário, para a modelagem do reator, o conhecimento da variação da temperatura desta parede ao longo do tempo. A equação que descreve a variação de energia térmica na parede da camisa é a seguinte:

$$M_j C_{p_j} \frac{dT_j}{dt} = h_{jo} A_{jo} (T_s - T_j) - h_j A_j (T_j - T) \quad (3.4)$$

3.3.1.1 - TAXA DE CALOR RETIRADO DO MEIO REACIONAL PELA SERPENTINA DE REFRIGERAÇÃO ($Q_{res.}$)

O calor trocado na refrigeração da massa reacional é igual a

variação de energia térmica do fluido refrigerante ao percorrer toda a extensão da serpentina. Considerando-se a massa do material metálico que constitui a serpentina pequena o suficiente, e possuindo este baixa capacidade calorífica, torna-se válida a suposição de que todo o calor perdido pelo meio reacional é transferido ao fluido refrigerante. Na hipótese de que esta troca térmica ocorra em regime semi-estacionário, a taxa de calor perdido pelo meio reacional é dada por:

$$Q_{res.} = F_c \rho_c C_{p_c} (T_{cf} - T_{co}) \quad (3.5)$$

ou ainda:

$$Q_{res.} = U_c A_c (lmtcd) = U_c A_c \frac{[(T - T_{cf}) - (T - T_{co})]}{\ln \frac{(T - T_{cf})}{(T - T_{co})}} \quad (3.6)$$

Mediante algebrismo matemático com as equações (3.5) e (3.6) é possível a eliminação da variável T_{cf} da expressão de $Q_{res.}$. Expressando-se $Q_{res.}$ em função das temperaturas T e T_{co} , tem-se que:

$$Q_{res.} = F_c \rho_c C_{p_c} (T - T_{co}) \left[1 - \exp\left(-\frac{U_c A_c}{F_c \rho_c C_{p_c}}\right) \right] \quad (3.7)$$

O coeficiente global de transferência de calor U_c é função de propriedades físicas tanto do meio reacional como do fluido

refrigerante, da faixa de número de Reynolds associado a agitação do meio reacional, da geometria da serpentina, e da velocidade de escoamento do fluido refrigerante.

Determinando-se propriedades físicas do fluido refrigerante relevantes no cálculo de U_c a uma temperatura média de operação do reator, então, somente o efeito da variação da vazão daquele fluido seria capaz de alterar seu valor. Segundo as correlações de Coulson e Richardson [22], a vazão de fluido refrigerante relaciona-se com o coeficiente U_c por uma equação do tipo:

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{A_1 F_c^b} + \frac{1}{A_2} \quad (3.8)$$

Assim, ao ser manipulada a vazão do fluido refrigerante que escoar na serpentina, altera-se a taxa de resfriamento do meio reacional, tanto pela variação do tempo de residência do refrigerante na serpentina, como pela variação do valor do coeficiente de troca térmica U_c .

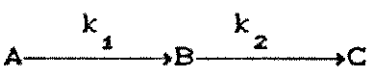
Na Tabela 3.1 encontram-se expostos todos os parâmetros necessários à modelagem e simulação do equipamento.

Tabela 3.1 - Parâmetros de Modelagem do Equipamento

Dados Relativos ao Meio Reacional			
$V = 1,0$	$C_p = 1,0$	$\rho = 1,0 \cdot 10^3$	
Dados Relativos ao Fluido Refrigerante e à Serpentina			
$C_{p_c} = 4,18$	$\rho_c = 1,0 \cdot 10^3$	$T_{co} = 25$	
$A_c = 5,0$	$A_1 = 1,504 \cdot 10^3$	$A_2 = 3,66$	
$b = 0,8$	$F_{c,min} = 2,50 \cdot 10^{-4}$	$F_{c,max} = 6,50 \cdot 10^{-3}$	
Dados Relativos ao Vapor e à Camisa			
$C_{p_j} = 1,13$	$M_j = 1168$	$T_{s,min} = 70,0$	$T_{s,max} = 150,0$
$A_{jo} = 4,3$	$A_j = 4,0$	$h_{jo} = 5,11$	$h_j = 4,22$

3.3.2 - MODELAGEM DA CINÉTICA DE REAÇÃO DO PROCESSO

No interior do reator são supostas ocorrerem duas reações genéricas consecutivas, do tipo:



A reação $A \longrightarrow B$ tem cinética de segunda ordem, enquanto que na conversão do composto B no composto C a cinética é de primeira ordem. Deste modo, as taxas de consumo das espécies A e B são dadas respectivamente pelas expressões:

$$r_1 = k_1(T) C_A^2 \tag{3.9}$$

$$r_2 = k_2(T) C_B \quad (3.10)$$

As equações provenientes dos balanços materiais, e necessárias para a descrição das reações que ocorrem no processo podem ser representadas por:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1(T) C_A^2 \quad (3.11)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1(T) C_A^2 - k_2(T) C_B \quad (3.12)$$

As constantes da taxa de reação, k_1 e k_2 , são função da temperatura, segundo o modelo dado pela equação de Arrhenius:

$$k_1(T) = k_{10} \exp\{-E_1/[R(T+273,15)]\} \quad (3.13)$$

$$k_2(T) = k_{20} \exp\{-E_2/[R(T+273,15)]\} \quad (3.14)$$

As reações de consumo das substâncias A e B são exotérmicas, sendo as entalpias das reações ΔH_1 e ΔH_2 Kcal/mol, respectivamente. Assim a taxa de calor gerado pelas reações do processo é dada pela equação:

$$Q_r = [r_1(-\Delta H_1) + r_2(-\Delta H_2)] V \quad (3.15)$$

Os parâmetros cinéticos das reações do processos estão apresentados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 - Parâmetros Cinéticos das Reações do Processo

$k_{10} = 1,1$	$k_{20} = 172,2$
$E_1 = 2,09 \cdot 10^4$	$E_2 = 4,18 \cdot 10^4$
$\Delta H_1 = - 4,18 \cdot 10^4$	$\Delta H_2 = - 8,36 \cdot 10^4$

3.3.2.1 - TRAJETÓRIA ÓTIMA PARA A TEMPERATURA DO MEIO REACIONAL AO LONGO DA OPERAÇÃO DO REATOR

Ray e Szekely [17] encontraram para o reator em que a variação das concentrações das substâncias A e B são dadas segundo as equações (3.11) e (3.12), respectivamente, e com os parâmetros cinéticos listados na Tabela 3.2, a seguinte trajetória ótima de temperatura do meio reacional:

$T_d = 54 + 71 \exp (-2,5 \cdot 10^{-3} t),$ (3.16)

Esta trajetória ótima implica na maximização da produção do composto B após uma hora de operação do reator.

A análise da equação (3.16) evidencia que a temperatura ótima do meio reacional na partida da batelada deveria ser igual a

125°C, decrescendo exponencialmente ao longo de toda a operação. Como o meio reacional está, no início da operação à temperatura ambiente, torna-se óbvio concluir que é impossível que se consiga o acompanhamento integral desta trajetória de temperatura. Além disso, a metodologia de controle adotada de elevar a temperatura do meio reacional tão rápido quanto possível até o valor da temperatura ótima apresenta alguns inconvenientes: um deles é a possibilidade da taxa de aquecimento do reator ocorrer de modo imprevisível. Por outro lado, a acentuada diferença entre os valores da temperatura do "setpoint" e da temperatura real do meio reacional, no início da operação, leva naturalmente à saturação dos controladores lineares usados na malha de controle de temperatura do processo.

Com o objetivo de se contornar estes inconvenientes na etapa de aquecimento do meio reacional, optou-se por impor ao sistema, para esta etapa, a seguinte trajetória de temperatura:

$$T_d = 25 + 0,36 t. \quad (3.17)$$

A equação acima define para o meio reacional uma elevação de temperatura, partindo inicialmente da temperatura ambiente, segundo uma função rampa, tal que, após 200 segundos de operação do reator tem-se concluída a etapa de aquecimento. A partir deste instante a massa reacional seria resfriada, então, acompanhando-se a trajetória definida pela equação (3.16). Note-se que o recurso a uma taxa constante de aquecimento na partida do reator, tal como

dado na equação (3.17) pode permitir ter em consideração as limitações físicas do processo (taxa máxima de transferência de calor, por exemplo), e normalizar as condições de operação para o caso em que a mesma reação venha a ser realizada em reatores diferentes.

No controle de temperatura do processo acima descrito a estratégia de controle adotada dividir-se-á em duas etapas de atuação. A etapa inicial, que dura os primeiros 200 segundos de operação, é a chamada etapa de aquecimento. Nela o meio reacional é aquecido, manipulando-se a temperatura do vapor alimentado no interior da camisa, mantendo-se a vazão de fluido refrigerante constante, e igual a duas vezes seu valor mínimo. Terminada esta etapa, dá-se início àquela de resfriamento do meio reacional. A variável manipulada desta etapa é a vazão do fluido refrigerante. A temperatura de vapor para toda a etapa de resfriamento foi mantida 10°C acima da temperatura do meio reacional em cada instante. As condições de operação do reator em batelada exotérmico para as etapas de aquecimento e resfriamento são sintetizadas na Tabela 3.3.

Tabela 3.3 - Condições das etapas de aquecimento e resfriamento de operação do reator em batelada exotérmico.

	Etapa de Aquecimento	Etapa de Resfriamento
Trajetória de T_d	$T_d = 25 + 0,36t$	$T_d = 54 + 71 \exp(-2,5 \cdot 10^{-3}t)$
Variável Manip.	Temperatura de Vapor	Vazão de Fluido Refrig.
Condição Adicional	$F_c = 2F_{c,min}$	$T_s = T + 10$
Duração	$t \leq 200s$	$200 \leq t \leq 3600s$

3.4 - SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA OPERAÇÃO DO REATOR

A solução simultânea das equações diferenciais que definem o comportamento do reator em batelada exotérmico apresentado anteriormente foi conseguida utilizando-se o método de Runge-Kutta-Gill de 4^a ordem. O desenvolvimento do método numérico aplicado ao exemplo em questão é exposto a seguir:

O sistema de equações diferenciais que descrevem a evolução do processo com o tempo é definido pelas equações:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1(T) C_A \quad (3.18)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1(T) C_A^2 - k_2(T) C_B \quad (3.19)$$

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{(Cp_j M_j)} \left\{ h_{j0} A_{j0} (T_s - T_j) - h_j A_j (T_j - T) \right\} \quad (3.20)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{(\rho V C_p)} \left\{ Q_r + h_j A_j (T_j - T) - F_c \rho_c C_{p_c} (T - T_{co}) \left[1 - \exp \left\{ \frac{(-U_c A_c)}{(F_c \rho_c C_{p_c})} \right\} \right] \right\} \quad (3.21)$$

onde $k_1(T)$, $k_2(T)$, U_c e Q_r são obtidos pelas equações (3.13), (3.14), (3.8) e (3.15), respectivamente.

As equações diferenciais do modelo definem o vetor $F(x)$, função das variáveis de estado do processo C_A, C_B, T_j, T , são:

$$\frac{dC_A}{dt} = F_1(C_A, C_B, T_j, T) \quad (3.22)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = F_2(C_A, C_B, T_j, T) \quad (3.23)$$

$$\frac{dT_j}{dt} = F_3(C_A, C_B, T_j, T) \quad (3.24)$$

$$\frac{dT}{dt} = F_4(C_A, C_B, T_j, T) \quad (3.25)$$

As condições iniciais das variáveis de estado do processo são as seguintes: $C_{A,0} = 1$; $C_{B,0} = 0$; $T_{j,0} = 25$; e $T_0 = 25$.

3.4.1 - ALGORITMO DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DO PROCESSO

Considere-se o vetor $F(C_A, C_B, T_j, T)$, cujos elementos são definidos pelas equações (3.22) a (3.25). Os valores das variáveis de estado do processo no passo $(n+1)$ da integração, isto é, $C_{A,n+1}$, $C_{B,n+1}$, $T_{j,n+1}$ e T_{n+1} podem ser calculados, dispondo-se de seu valor no instante anterior (mantidas constantes a temperatura do vapor e a vazão de fluido refrigerante entre os dois intervalos, iguais a $T_{s,n}$ e $F_{c,n}$, respectivamente), segundo o algoritmo apresentado a seguir, baseado no método de Runge-Kutta-Gill de 4^a ordem:

$$K(1,1) = h F_1 (C_{A,n}, C_{B,n}, T_{j,n}, T_n) \quad (3.26a)$$

$$K(2,1) = h F_2 (C_{A,n}, C_{B,n}, T_{j,n}, T_n) \quad (3.26b)$$

$$K(3,1) = h F_3 (C_{A,n}, C_{B,n}, T_{j,n}, T_n) \quad (3.26c)$$

$$K(4,1) = h F_4 (C_{A,n}, C_{B,n}, T_{j,n}, T_n) \quad (3.26d)$$

$$C_{A,n1} = C_{A,n} + 0,5 K(1,1) \quad (3.27a)$$

$$C_{B,n1} = C_{B,n} + 0,5 K(2,1) \quad (3.27b)$$

$$T_{j,n1} = T_{j,n} + 0,5 K(3,1) \quad (3.27c)$$

$$T_{n1} = T_n + 0,5 K(4,1) \quad (3.27d)$$

$$K(1,2) = h F_1 (C_{A,n1}, C_{B,n1}, T_{j,n1}, T_{n1}) \quad (3.28a)$$

$$K(2,2) = h F_2 (C_{A,n1}, C_{B,n1}, T_{j,n1}, T_{n1}) \quad (3.28b)$$

$$K(3,2) = h F_3 (C_{A,n1}, C_{B,n1}, T_{j,n1}, T_{n1}) \quad (3.28c)$$

$$K(4,2) = h F_4 (C_{A,n1}, C_{B,n1}, T_{j,n1}, T_{n1}) \quad (3.28d)$$

$$C_{A,n2} = C_{A,n} + a K(1,1) + b K(1,2) \quad (3.29a)$$

$$C_{B,n2} = C_{B,n} + a K(2,1) + b K(2,2) \quad (3.29b)$$

$$T_{j,n2} = T_{j,n} + a K(3,1) + b K(3,2) \quad (3.29c)$$

$$T_{n2} = T_n + a K(4,1) + b K(4,2) \quad (3.29d)$$

$$K(1,3) = h F_1 (C_{A,n2}, C_{B,n2}, T_{j,n2}, T_{n2}) \quad (3.30a)$$

$$K(2,3) = h F_2 (C_{A,n2}, C_{B,n2}, T_{j,n2}, T_{n2}) \quad (3.30b)$$

$$K(3,3) = h F_3 (C_{A,n2}, C_{B,n2}, T_{j,n2}, T_{n2}) \quad (3.30c)$$

$$K(4,3) = h F_4 (C_{A,n2}, C_{B,n2}, T_{j,n2}, T_{n2}) \quad (3.30d)$$

$$C_{A,n3} = C_{A,n} + c K(1,2) + d K(1,3) \quad (3.31a)$$

$$C_{B,n3} = C_{B,n} + c K(2,2) + d K(2,3) \quad (3.31b)$$

$$C_{j,n3} = T_{j,n} + c K(3,2) + d K(3,3) \quad (3.31c)$$

$$T_{n3} = T_n + c K(4,2) + d K(4,3) \quad (3.31d)$$

$$K(1,4) = h F_1 (C_{A,n3}, C_{B,n3}, T_{j,n3}, T_{n3}) \quad (3.32a)$$

$$K(2,4) = h F_2 (C_{A,n3}, C_{B,n3}, T_{j,n3}, T_{n3}) \quad (3.32b)$$

$$K(3,4) = h F_3(C_{A,n3}, C_{B,n3}, T_{j,n3}, T_{n3}) \quad (3.32c)$$

$$K(4,4) = h F_4(C_{A,n3}, C_{B,n3}, T_{j,n3}, T_{n3}) \quad (3.32d)$$

$$C_{A,n+1} = C_{A,n} + (1/6) [K(1,1) + K(1,4)] + (1/3) [b K(1,2) + d K(1,3)] \quad (3.33a)$$

$$C_{B,n+1} = C_{B,n} + (1/6) [K(2,1) + K(2,4)] + (1/3) [b K(2,2) + d K(2,3)] \quad (3.33b)$$

$$T_{j,n+1} = T_{j,n} + (1/6) [K(3,1) + K(3,4)] + (1/3) [b K(3,2) + d K(3,3)] \quad (3.33c)$$

$$T_{n+1} = T_n + (1/6) [K(4,1) + K(4,4)] + (1/3) [b K(4,2) + d K(4,3)] \quad (3.33d)$$

Obtidos os valores das variáveis de estado no instante $n+1$, emprega-se novamente o algoritmo, formado pelas equações (3.26) a (3.33), até que tenha-se simulado toda a operação do reator.

O algoritmo exposto acima estima os valores das variáveis C_A , C_B , T_j e T , do processo, a cada intervalo de tempo, definido como passo de integração, h . Maior precisão no cálculo daquelas variáveis é conseguida com a diminuição do valor deste passo. Como consequência, porém, maior será o esforço computacional para a simulação do processo.

Para as simulações realizadas neste trabalho o passo de integração será, a menos que mencionado o contrário, igual a 0,05 segundos.

CAPÍTULO 4 - DESENVOLVIMENTO DA ESTRATÉGIA DE CONTROLE DO REATOR EM BATELADA EXOTÉRMICO

4.1 - INTRODUÇÃO

A opção pelo emprego de reatores do tipo batelada visando a promoção de alguma reação de interesse está normalmente associada a processos químicos que apresentam as seguintes características:

- a) Baixa taxa de reação;
- b) Existência de várias etapas de operação;
- c) Necessidade de isolamento do meio reacional (seja por questões de segurança, ou para atender especificações de pureza do produto);
- d) Taxa de produção reduzida;
- e) Tecnologia de produção em constante evolução.

Pelo último dos aspectos mencionado vê-se que um estudo detalhado da cinética de reação em processos do tipo batelada pode resultar em dispêndio de mão-de-obra e recursos financeiros nem sempre justificáveis. A viabilidade da tecnologia de produção, bem como o interesse comercial pelo produto, são capazes de mudar em curtos períodos de tempo.

A ocorrência de reatores em batelada que são operados sem um satisfatório conhecimento da cinética de reação é freqüente. Visando reproduzir tal dificuldade, a estratégia de controle é aplicada neste trabalho para o reator apresentado no capítulo anterior supondo-se desconhecida a cinética das reações, isto é, dispondo-se apenas das equações de balanço de energia no

equipamento (equações (3.20) e (3.21)). É também admitido que a única variável de estado medida no processo é a temperatura do meio reacional, e esta medição ocorre a cada instante de atuação do controlador. A taxa de calor gerado na reação será considerada uma variável do processo. Seu valor, como também os das temperaturas da camisa de vapor e do fluido refrigerante na saída da serpentina de refrigeração, serão estimados ao longo de toda a simulação da operação do reator, no mesmo momento em que é medida a temperatura do meio reacional. A temperatura do vapor na camisa e a vazão do fluido refrigerante -variáveis manipuladas do processo na etapa de aquecimento e de resfriamento, respectivamente- são conhecidas a cada instante de atuação do controlador digital. Entre cada dois instantes sucessivos de ação de controle as variáveis manipuladas do processo são mantidas constantes.

A estratégia de controle utilizada para controlar a temperatura do reator é a do Controle Globalmente Linearizado (GLC), apresentada no Capítulo 2.

4.2 - MODELAGEM DO REATOR PARA O PROJETO DA MALHA DE CONTROLE

Uma vez admitido o desconhecimento da cinética da reação que ocorre no reator, as equações disponíveis, do modelo do processo, para o projeto da malha de controle são:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{(\rho V C_p)} \left\{ Q_r + h_j A_j (T_j - T) + F_c \rho_c C_{p_c} (T_{co} - T_{cf}) \right\} \quad (4.1)$$

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{(M_j C_{p_j})} \left\{ h_{jo} A_{jo} (T_s - T_j) - h_j A_j (T_j - T) \right\} \quad (4.2)$$

onde,

$$T_{cf} = T_{co} + (T - T_{co}) \left[1 - \exp \left(\frac{- U_c A_c}{F_c \rho_c C_{p_c}} \right) \right] \quad (4.3)$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{A_1 F_c^b} + \frac{1}{A_2} \quad (4.4)$$

Arbitrando-se um instante genérico t_{m+1} de atuação do controlador de temperatura do meio reacional, as variáveis T_j , T_{cf} e Q_r podem ser estimadas acompanhando-se o procedimento disposto a seguir.

4.2.1 - ESTIMATIVA DA TEMPERATURA DA PAREDE DA CAMISA DE VAPOR

(T_j)

A estimativa da temperatura da parede da camisa de vapor no instante t_{m+1} de atuação do controlador, é feita recorrendo-se à equação (4.2), seguindo-se o seguinte cálculo iterativo:

$$T_{j,m+1}^* = T_{j,m} \quad (4.5)$$

$$T_{j,m+1} = T_{j,m} + \frac{\Delta}{(M_j C_{p_j})} \left\{ h_{j0} A_{j0} \left[T_{s,m} - \frac{T_{j,m+1}^* + T_{j,m}}{2} \right] - h_j A_j \left[\frac{T_{j,m+1}^* + T_{j,m}}{2} - \frac{T_{m+1} + T_m}{2} \right] \right\} \quad (4.6)$$

$$\varepsilon = |T_{j,m+1} - T_{j,m+1}^*| \quad (4.7)$$

Caso o valor de ε seja maior que 0,01 (erro máximo aceito aqui), retorna-se à equação (4.5) com o novo valor de $T_{j,m+1}^*$ dado por $T_{j,m+1}$ obtido na iteração anterior. Estes cálculos são repetidos até que a condição de convergência de $T_{j,m+1}$ seja atendida.

4.2.2 - ESTIMATIVA DA TEMPERATURA DO FLUIDO REFRIGERANTE NA SAÍDA DA SERPENTINA (T_{cf})

A temperatura do fluido refrigerante na saída da serpentina no instante t_{m+1} de atuação de controle pode ser determinada solucionando-se a equação:

$$T_{cf,m+1} = T_{co} + (T_{m+1} - T_{co}) \left[1 - \exp \left(\frac{-U_{c,m} A_c}{F_{c,m} \rho_c C_{p_c}} \right) \right] \quad (4.8)$$

4.2.3 - ESTIMATIVA DA TAXA DE CALOR DE REAÇÃO (Q_r)

Promovendo-se a discretização da equação (4.1) entre dois instantes sucessivos de atuação do controlador, correspondentes aos instantes t_m e t_{m+1} , é possível a estimativa da taxa de geração de calor da reação no instante t_{m+1} pela expressão:

$$Q_{r,m+1} = (\rho V C_p) \frac{T_{m+1} - T_m}{\Delta} - h_j A_j \left[\frac{T_{j,m+1} + T_{j,m}}{2} - \frac{T_{m+1} + T_m}{2} \right] - F_{c,m+1} \rho_c C_{p_c} \left[T_{c0} - \frac{T_{cf,m+1} + T_{cf,m}}{2} \right] \quad (4.9)$$

4.3 - DESENVOLVIMENTO DA ESTRATÉGIA DE CONTROLE GLC APLICADA AO REATOR EM BATELADA EXOTÉRMICO

A estratégia de controle GLC basea-se na obtenção de uma lei de controle "feedback", expressa por uma função das variáveis de estado do processo, que possibilite sua representação por uma função de transferência do tipo:

$$G_p(s) = \frac{1}{\beta_r s^r + \beta_{r-1} s^{r-1} + \dots + \beta_1 s + \beta_0} \quad (4.10)$$

A estratégia de controle de temperatura do reator em batelada estudado envolve duas etapas de atuação. Inicialmente tem-se a etapa de aquecimento do reator, com a variável manipulada do processo sendo a temperatura do vapor. Em seguida acontece a fase

de resfriamento do meio reacional, quando então manipula-se a vazão do fluido refrigerante. Com isso, torna-se necessária a obtenção de duas distintas leis de controle, cada qual para uma etapa de operação do reator.

A seqüência de passos a serem seguidos para a aplicação do método GLC ao controle do reator aqui modelado é a mesma feita quando da reprodução do exemplo de processo estudado por Kravaris e Chung (encontrada no Capítulo 2). Sua apresentação é dada adiante para cada uma das etapas de operação do reator.

4.3.1 - DESENVOLVIMENTO DA LEI DE REALIMENTAÇÃO DEFINIDA PELO MÉTODO GLC PARA A ETAPA DE AQUECIMENTO DO REATOR

O modelo dinâmico do reator é definido pelas equações (4.1) e (4.2), e a variável manipulada é a temperatura do vapor. Colocando-se o modelo do processo na forma do sistema de equações (2.6), sendo as variáveis de estado dadas por: $x_1 = T$, e $x_2 = T_j$, os vetores $f(x)$ e $g(x)$, e o escalar $h(x)$, ficam assim expressos:

$$f(x) = \begin{bmatrix} \frac{1}{(\rho V C_p)} \{ Q_r + h_j A_j (T_j - T) + F_c \rho_c C_{p_c} (T_{co} - T_{ci}) \} \\ \frac{1}{(M_j C_{p_j})} \{ -h_{jo} A_{jc} T_j - h_j A_j (T_j - T) \} \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

$$g(x) = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{h_{jo} A_{jo}}{M_j C_{p_j}} \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

$$h(x) = T \quad (4.13)$$

Determinação da Ordem Relativa do Processo na Etapa de Aquecimento

O menor número inteiro capaz de satisfazer a equação (2.10), para os vetores $g(x)$ e $f(x)$, e o escalar $h(x)$ definidos pelas equações (4.11) a (4.13), é igual a 2, pois:

$$L_{g(x)} h(x) = \frac{\partial h(x)}{\partial x_1} g_1(x) + \frac{\partial h(x)}{\partial x_2} g_2(x) = 0 \quad (4.14)$$

$$L_{g(x)} L_{f(x)} h(x) = L_{g(x)} f_1(x) = \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} g_1(x) + \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_2} g_2(x) \quad (4.15)$$

então,

$$L_{g(x)} L_{f(x)} h(x) = \frac{h_{jo} A_{jo} h_j A_j}{M_j C_{p_j} \rho V C_p} \quad (4.16)$$

Uma vez que o resultado da equação (4.14) é igual a zero, enquanto que o valor encontrado para a equação (4.16) não é nulo, conclui-se que a ordem relativa do processo para a etapa de aquecimento do reator é igual a 2.

A lei de realimentação resultante da estratégia GLC que equaciona o comportamento da variável manipulada (T_j) ao longo da etapa de aquecimento do processo é definida pela equação (2.9), com o valor de r igual a 2. Esta lei de realimentação não-linear

para a etapa em questão é:

$$T_s = \frac{v_1 - \beta_{01} h(x) - \beta_{11} L_{f(x)} h(x) - \beta_{21}^2 L_{f(x)}^2 h(x)}{\beta_{21} L_{g(x)} L_{f(x)} h(x)} \quad (4.17)$$

onde,

$$L_{f(x)} h(x) = f_1(x) \quad (4.18)$$

$$L_{f(x)}^2 h(x) = \frac{h_j A_j}{\rho V C_p} [f_2(x) - f_1(x)] \quad (4.19)$$

sendo v_1 a variável manipulada fictícia então definida pelo método GLC.

Os valores de $h(x)$ e $L_{g(x)} L_{f(x)} h(x)$ são dados pelas equações (4.13) e (4.16).

Sob forma pouco mais simplificada, e definido para um instante t_{m+1} de atuação do controlador, o valor da variável manipulada T_s pode ser expresso em termos do valor de v_1 , por:

$$T_{s,m+1} = \frac{1}{\beta_{21}} \frac{M_j C_{p_j} \rho V C_p}{h_{jo} A_{jo} h_j A_j} (v_{1,m+1} - \beta_{01} T_{m+1}) + M_j C_{p_j} \left[\frac{(\beta_{21} h_j A_j - \beta_{11} \rho V C_p)}{M_j C_{p_j} h_{jo} A_{jo} h_j A_j} \left\{ Q_r + h_j A_j (T_{j,m+1} - T_{m+1}) + F_{c,m+1} [\right. \right. \\ \left. \left. \rho_c C_{p_c} (T_{co} - T_{cf,m+1}) \right] \right\} + \frac{h_j A_j}{h_{jo} A_{jo}} (T_{j,m+1} - T_{m+1}) + T_{j,m+1} \right] \quad (4.20)$$

4.3.2 - DESENVOLVIMENTO DA LEI DE REALIMENTAÇÃO DADA PELO MÉTODO GLC PARA A ETAPA DE RESFRIAMENTO DO REATOR

O comportamento do reator continua, para a etapa de resfriamento, sendo descrito pelas equações (4.1) e (4.2). A variável manipulada agora, porém, é a vazão do fluido refrigerante.

Na consideração de que o vetor das variáveis de estado mantém-se o mesmo suposto anteriormente para a etapa de aquecimento, os vetores $f(x)$, $g(x)$ ficam iguais a:

$$f(x) = \begin{bmatrix} \frac{1}{(\rho V C_p)} \{ Q_r + h_{j,j} A_{j,j} (T_{j,j} - T) \} \\ \frac{1}{(M_{j,j} C_{p,j})} \{ h_{j,o} A_{j,j} (T_{j,j} - T_{j,j}) - h_{j,j} A_{j,j} (T_{j,j} - T) \} \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

$$g(x) = \begin{bmatrix} \frac{\rho_c C_{p,c}}{\rho V C_p} (T_{co} - T_{cf}) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

A função escalar $h(x)$ é preservada pela equação (4.13), posto que a variável controlada do processo continua sendo a temperatura do meio reacional.

Determinação da Ordem Relativa do Processo na Etapa de Resfriam.

A ordem relativa do processo na etapa de resfriamento é de 1, pois para as funções $h(x)$, $f(x)$ e $g(x)$, expressas pelas equações (4.13), (4.21) e (4.22), respectivamente, tem-se que:

$$L_{g(x)} h(x) = \frac{\rho_c C_{p_c}}{\rho V C_p} (T_{co} - T_{cf}) \quad (4.23)$$

O valor da vazão do fluido refrigerante para a etapa de resfriamento do reator, segundo o método GLC, para uma ordem relativa de 1, é igual a:

$$F_c = \frac{v_2 - \beta_{02} h(x) - \beta_{12} L_{f(x)} h(x)}{\beta_{12} L_{g(x)} h(x)} \quad (4.24)$$

onde,

$$L_{f(x)} h(x) = \frac{1}{\rho V C_p} \{ Q_r + h_j A_j (T_j - T) \} \quad (4.25)$$

A equação (4.24) discretizada para cada instante de ação de controle pode ser apresentada como:

$$F_{c,m+1} = \frac{\rho V C_p}{\rho_c C_{p_c} (T_{co} - T_{c,m+1})} \left\{ \beta_{12} v_{2,m+1} - \frac{\beta_{02}}{\beta_{12}} T_{m+1} - \left\{ Q_{r,m+1} + h_j A_j (T_{j,m+1} - T_{m+1}) \right\} \right\} \quad (4.26)$$

4.4 - REPRESENTAÇÃO DAS MALHAS DE CONTROLE GLC PARA AS ETAPAS DE AQUECIMENTO E RESFRIAMENTO DO REATOR

Na operação do reator a temperatura do meio reacional é a única variável medida diretamente no processo. A taxa do calor de reação, a temperatura da parede da camisa de vapor, e a temperatura do fluido refrigerante devem ser estimadas durante a evolução do processo, pois as leis de controle não-lineares são dependentes dos seus valores (equações (4.20) e (4.26)). A estimativa destas variáveis é feita por um estimador de estado. A estrutura de cada uma das malhas de controle GLC empregadas nas duas etapas de operação do reator é representada nas Figuras 4.1 e 4.2.

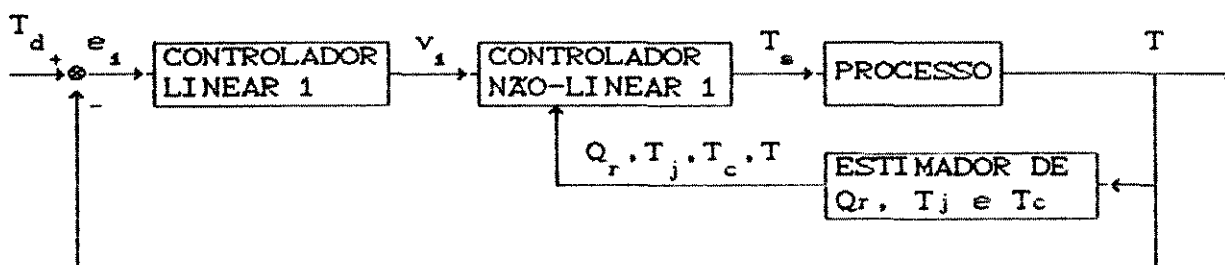


FIGURA 4.1 - Esquema da malha de controle de temperatura do meio reacional para a etapa de aquecimento do reator, empregando-se a estratégia de controle GLC.

A configuração do controlador não-linear 1 permite que, no domínio de Laplace, as variáveis $v_1(s)$ e $T(s)$ sejam relacionadas de acordo com a seguinte função de transferência:

$$\frac{T(s)}{V_1(s)} = \frac{1}{\beta_{21}s^2 + \beta_{11}s + \beta_{01}},$$

(4.27)

pois na etapa de aquecimento do reator a ordem relativa do processo é igual a 2.

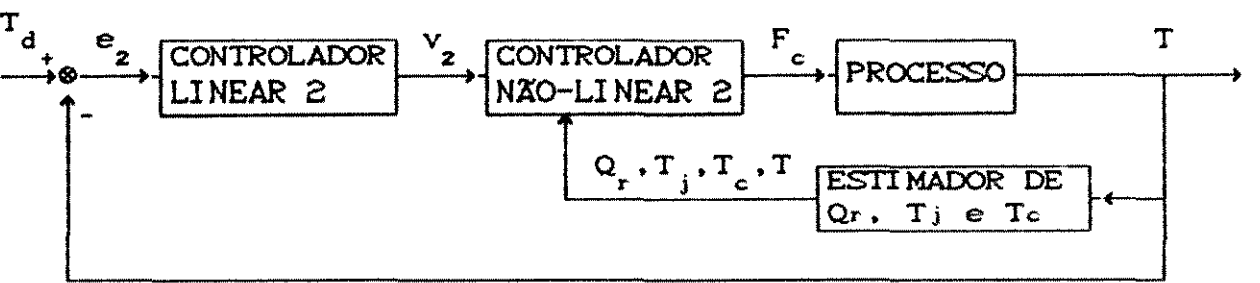


FIGURA 4.2 - Esquema da malha de controle de temperatura do meio reacional para a etapa de resfriamento do reator, com a utilização da estratégia de controle GLC.

Para a etapa de resfriamento do reator, a lei de controle não-linear, expressa pela equação (4.26), dá origem a uma função de transferência de 1^a. ordem associando as variáveis $v_2(s)$ e $T(s)$. Esta função de transferência é dada pela equação (4.9), com r igual a 1. Assim, tem-se que:

$$\frac{T(s)}{V_2(s)} = \frac{1}{\beta_{12}s + \beta_{02}}.$$

(4.28)

Podendo-se representar o processo pelas funções de

transferência (4.27) e (4.28), para as etapas de aquecimento ou resfriamento, as malhas de controle dadas nas Figuras 4.1 e 4.2 podem ser representadas em termos de funções de transferência, tal como mostram as Figuras 4.3 e 4.4.

Os parâmetros de sintonização β 's, que aparecem nas malhas de controle das Figuras 4.3 e 4.4 são de livre escolha, por parte do projetista. Com isto, torna-se possível estipular a dinâmica desejada envolvendo os sinais de entrada ($v(s)$) e saída ($y(s)$). Definida esta dinâmica, o projeto do controlador linear que compõe a malha pode ser feito baseando-se em algum dos métodos clássicos de sintonização.

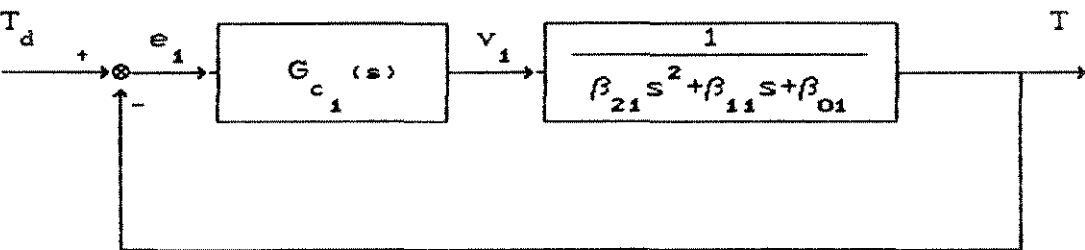


FIGURA 4.3 - Malha de controle GLC, da temperatura do meio reacional, para a etapa de aquecimento do reator, expressa em termos de funções de transferência.

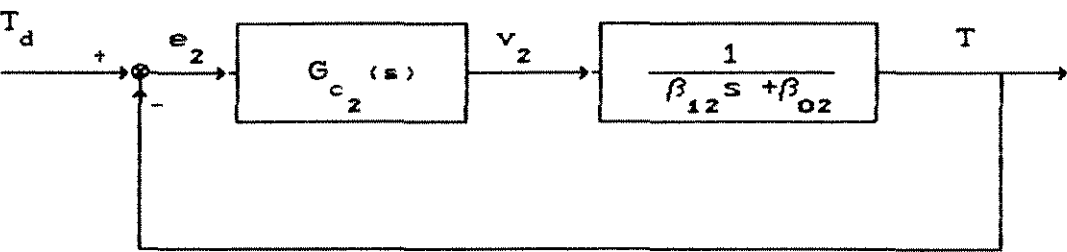


FIGURA 4.4 - Malha de controle GLC, da temperatura do meio reacional, para a etapa de resfriamento do reator, expressa em termos de funções de transferência.

CAPÍTULO 5 - SIMULAÇÃO DO CONTROLE DO REATOR EM BATELADA EXOTÉRMICO

5.1 - INTRODUÇÃO

No capítulo anterior foram desenvolvidas as leis de controle dadas pela estratégia GLC que conduzem à linearização do modelo do processo para as duas etapas de operação do reator.

Para a etapa de aquecimento a lei de controle não-linear (4.20) dá origem à função de transferência do processo descrita segundo a equação (4.27), que pode ser colocada na forma:

$$G_{p1}(s) = \frac{T(s)}{V_1(s)} = \frac{\frac{1}{\beta_{01}}}{\frac{\beta_{21}}{\beta_{01}} s^2 + \frac{\beta_{11}}{\beta_{01}} s + 1} \quad (5.1)$$

Para a etapa de resfriamento do reator a função de transferência do processo definida na equação (4.28) é equivalente a equação:

$$G_{p2}(s) = \frac{T(s)}{V_2(s)} = \frac{\frac{1}{\beta_{02}}}{\frac{\beta_{12}}{\beta_{02}} s + 1} \quad (5.2)$$

As equações (5.1) e (5.2) evidenciam com clareza que a dinâmica do processo em ambas as etapas de operação do reator é dependente dos valores dos parâmetros β 's. A definição destes valores é de livre escolha por parte do projetista da malha de controle, e influencia diretamente na sintonização do controlador linear que a compõe.

A pré-sintonização dos controladores lineares existentes nas duas malhas GLC projetadas para o controle do reator (Figuras 4.3 e 4.4) é feita neste trabalho utilizando-se o método da Síntese Direta [23].

5.2 - SINTONIZAÇÃO DOS CONTROLADORES LINEARES DAS MALHAS GLC PELO MÉTODO DA SÍNTESE DIRETA

O método da Síntese Direta define os parâmetros de sintonização dos controladores lineares, de tal modo que, em malha fechada, o sistema obedeça a uma dinâmica pré-estabelecida.

Para as duas etapas de operação do reator optou-se por impor ao sistema uma dinâmica de 1^a ordem em malha fechada. A constante de tempo desta malha (τ_{CL}), que relaciona a temperatura controlada e seu "setpoint", é fixada em 5 segundos para todas as simulações.

A função de transferência envolvendo os sinais $T(s)$ e $T_{sp}(s)$ é dada por:

$$\frac{T(s)}{T_{sp}(s)} = G_{CL}(s) = \frac{1}{\tau_{CL} s + 1} \quad (5.3)$$

Uma malha de controle GLC típica pode ser representada de forma simplificada, pela Figura 5.1. Vê-se por esta figura que as únicas funções de transferência desta malha são a do processo ($G_p(s)$), e aquela do controlador linear ($G_c(s)$).

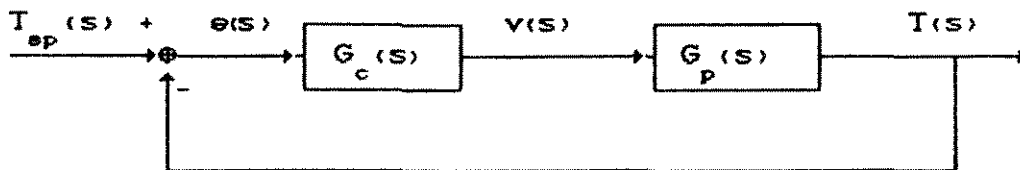


FIGURA 5.1 - Representação Simplificada da Malha OLC de Controle da Temperatura do Reator em Batelada Exotérmico.

Em malha fechada a função de transferência entre os sinais $T(s)$ e $T_{sp}(s)$ é expressa por:

$$\frac{T(s)}{T_{sp}(s)} = G_{CL}(s) = \frac{G_c(s) G_p(s)}{1 + G_c(s) G_p(s)} \quad (5.4)$$

Explicitando-se a função de transferência do controlador linear $G_c(s)$ na equação (5.4) tem-se que:

$$G_c(s) = \frac{G_{CL}(s)}{G_p(s) (1 - G_{CL}(s))} \quad (5.5)$$

A função de transferência da malha fechada ($G_{CL}(s)$) é dada pela equação (5.3), enquanto que a função de transferência do processo varia conforme a etapa de operação do reator. Durante a etapa de aquecimento sua expressão é calculada pela equação (5.1), já para a etapa de resfriamento a equação (5.2) é a que define a dinâmica do processo. Esta diferença entre as expressões de $G_p(s)$ de acordo com a etapa de operação do reator deixa ver, pela equação (5.5), que a configuração do controlador linear não será a

mesma para ambas as etapas.

5.2.1 - PROJETO DO CONTROLADOR LINEAR DA MALHA GLC DA ETAPA DE AQUECIMENTO DO REATOR

O controlador linear projetado para incorporar a malha de controle GLC na operação de aquecimento do reator, seguindo-se o método de sintonização da Síntese Direta, pode ser obtido pela substituição direta das funções de transferência $G_p(s)$ e $G_{CL}(s)$, dadas pelas equações (5.1) e (5.3), respectivamente. Ao ser seguido este procedimento obtém-se a seguinte expressão para a função de transferência do controlador linear:

$$G_{c1}(s) = \frac{\beta_{11}}{\tau_{CL}} \left[1 + \frac{\beta_{01}}{\beta_{11}} \frac{1}{s} + \frac{\beta_{21}}{\beta_{11}} s \right] \quad (5.6)$$

A equação (5.6) mostra que o controlador linear $G_{c1}(s)$ é um controlador do tipo PID, cujos parâmetros são:

$$K_{c1} = \frac{\beta_{11}}{\tau_{CL}} \quad (5.7)$$

$$\tau_{11} = \frac{\beta_{11}}{\beta_{01}} \quad (5.8)$$

$$\tau_{D1} = \frac{\beta_{21}}{\beta_{11}} \quad (5.9)$$

5.2.2 - PROJETO DO CONTROLADOR LINEAR DA MALHA GLC DA ETAPA DE
RESFRIAMENTO DO REATOR

Nesta etapa de operação a função de transferência do processo é representada pela equação (5.2). A função de transferência do processo em malha fechada continua sendo admitida como aquela mostrada na equação (5.3). Substituindo-se ambas as equações na equação (5.5) encontra-se, para o controlador linear, a função de transferência:

$$G_{c2}(s) = \frac{\beta_{12}}{\tau_{CL}} \left[1 + \frac{\beta_{02}}{\beta_{12}} \frac{1}{s} \right] \quad (5.10)$$

Analisando-se a equação (5.10) conclui-se que o controlador linear definido pelo método da Síntese Direta para a etapa de resfriamento do reator é do tipo PI, com os parâmetros:

$$k_{c2} = \frac{\beta_{12}}{\tau_{CL}} \quad (5.11)$$

$$\tau_{12} = \frac{\beta_{12}}{\beta_{02}} \quad (5.12)$$

5.3 - DESEMPENHO DE MALHAS DE CONTROLE

A avaliação do desempenho de uma malha de controle usa critérios como: a) estabilidade da malha fechada; b) ausência de

"offset"; c) minimização da ação das perturbações; d) resposta rápida e suave à variações no "setpoint"; e) robustez; f) inexistência de ação excessiva de controle. Todos estes critérios estão diretamente envolvidos com a sintonização dos controladores existentes na malha.

Variados são os métodos de avaliação do desempenho de malhas de controle disponíveis na literatura. Alguns deles definem índices que levam em consideração apenas parte da resposta da malha fechada de controle, ao invés de analisar a resposta da malha para toda a operação do processo, como o método empírico desenvolvido por Ziegler e Nichols [24] (chamado de Razão de Decaimento de 1/4). São amplamente conhecidos, no entanto, índices capazes de avaliar o desempenho da resposta integral da malha de controle. Dentre estes índices, podem ser citados: a) Integral do Valor Absoluto do Erro (IAE); b) Integral do Erro Quadrático (ISE); c) Integral do Erro Absoluto com Ponderação do Tempo (ITAE). O erro é calculado pela diferença entre os valores da variável controlada e de seu "setpoint" ao longo de toda a resposta da malha.

5.3.1 - CRITÉRIOS ADOTADOS PARA AVALIAR O DESEMPENHO DAS MALHAS DE CONTROLE GLC

Adotou-se aqui, como forma de se avaliar o desempenho das malhas de controle, o critério do IAE, índice que trata cada valor

de erro com igual peso, independente da sua intensidade ou instante de tempo de operação do processo em que ocorre.

Como as variáveis do processo são conhecidas somente a cada intervalo de integração das equações diferenciais do modelo do reator, a expressão usada para calcular o valor do IAE da resposta das malhas GLC é dada por:

$$IAE = \sum_{0}^n \left\{ \frac{|e_n + e_{n-1}|}{2} h \right\}, \quad (5.13)$$

com $0 \leq n \leq (t_{op}/h)$.

A cada malha de controle GLC que atua numa etapa distinta da operação do reator está associado um valor de IAE, bem como um tempo de operação. Na etapa de aquecimento do reator o tempo de operação do processo (t_{op}) é de 200 segundos. Para a etapa de resfriamento o tempo de operação dura dos primeiros 200 segundos até o final da operação do processo.

De acordo com o critério adotado, quanto menor o valor de IAE na resposta da malha de controle melhor é o seu desempenho.

A avaliação do desempenho das malhas de controle GLC aqui feita usa não apenas os valores de IAE, mas também envolve uma avaliação da intensidade da ação de controle. Esta avaliação é medida por uma variável (definida aqui) chamada de esforço de controle (EC), definida da forma:

$$EC = \left[\sum_{0}^m \left| \frac{u_m - u_{m-1}}{u_{\max} - u_{\min}} \right| \right] \frac{1}{m} 100\% \quad (5.14)$$

com $0 \leq m \leq (t_{op}/\Delta)$.

De modo semelhante ao que se espera para o valor do IAE, o valor da variável esforço de controle deve ser mínimo para a resposta da malha de controle, pois assim menor fica sendo a necessidade de atuação do controlador, e maior a vida útil dos atuadores empregados.

5.4 - SIMULAÇÃO DO CONTROLE DE TEMPERATURA DO REATOR

5.4.1 - CONTROLE DE TEMPERATURA DO REATOR NA ETAPA DE AQUECIMENTO

5.4.1.1 - DESCRIÇÃO DOS SISTEMAS CONSIDERADOS PARA REPRESENTAR A DINÂMICA DO PROCESSO

A função de transferência do processo para a etapa de aquecimento do reator, resultante da linearização do tipo entrada(v)/saída(y), é definida pela equação (5.1). Como pode-se ver, os parâmetros β 's que nela aparecem associam-se aos parâmetros de um processo de segunda ordem, de fase mínima, dados por:

$$K_{p1} = \frac{1}{\beta_{01}} \quad (5.15)$$

$$\zeta_1 = \frac{1}{2} \frac{\beta_{11}}{\beta_{21}} \sqrt{\frac{\beta_{21}}{\beta_{01}}} \quad (5.16)$$

$$\tau_{p1} = \sqrt{\frac{\beta_{21}}{\beta_{01}}}$$

(5.17)

São inicialmente considerados 4 conjuntos de parâmetros (β_{01} , β_{11} , β_{21}), para os quais correspondem 4 diferentes dinâmicas de processo, todos com o mesmo ganho e fator de amortecimento, porém com constantes de tempo distintas. Estes 4 conjuntos encontram-se definidos na Tabela 5.1.

TABELA 5.1 - Descrição das 4 dinâmicas consideradas para representar o processo na etapa de aquecimento do reator.

Conjunto de parâmetros	β_{01}	β_{11} (s)	β_{21} (s ²)	K_{p1}	ζ_1	τ_{p1} (s)
I	10 ⁻²	3	100	100	1,5	100
II	10 ⁻²	1,8	36	100	1,5	60
III	10 ⁻²	0,6	4	100	1,5	20
IV	10 ⁻²	0,18	0,36	100	1,5	6

5.4.1.2 - PRÉ-SINTONIZAÇÃO DA MALHA DE CONTROLE GLC PELO MÉTODO DA SÍNTESE DIRETA PARA OS 4 CONJUNTOS DE PARÂMETROS

A cada um dos 4 conjuntos definidos acima corresponde uma diferente sintonização do controlador linear da malha projetado pelo método da Síntese Direta. Os parâmetros deste controlador são

dados em função dos valores dos β 's do processo, como mostram as equações (5.7) a (5.9); o parâmetro τ_{CL} , definido na equação (5.3) é considerado aqui igual a 5 segundos para todas as simulações (como dito anteriormente).

Na Tabela 5.2 são dados os valores dos parâmetros, obtidos pela S.D., do controlador linear que compõe a malha GLC, para cada conjunto de parâmetros β . Na mesma tabela aparecem os valores encontrados para os índices de performance IAE e EC resultantes da resposta de cada uma das 4 malhas assim sintonizadas.

A evolução da temperatura do meio reacional, comparada com a trajetória desejada, e o comportamento da variável manipulada do processo ao longo de toda a etapa de aquecimento para as malhas GLC definidas na Tabela 5.2 são apresentados nas Figuras 5.2.1 a 5.2.4. Cabe salientar que o intervalo de controle (Δ) considerado para estas simulações, bem como de todas aquelas realizadas neste trabalho, é de 5 segundos.

TABELA 5.2 - Descrição dos parâmetros do controlador linear obtidos pela S.D. para cada conjunto de β 's, e valores de IAE e EC para a resposta de cada malha GLC.

Conjunto de parâm. β	K_{c1}	τ_{I1} (s)	τ_D (s)	IAE ($^{\circ}\text{Cs}$)	EC (%)
I	0,6	300	33	479	7,5
II	0,36	180	20	468	8,3
III	0,12	60	7	484	11,4
IV	0,036	18	2	613	7,6

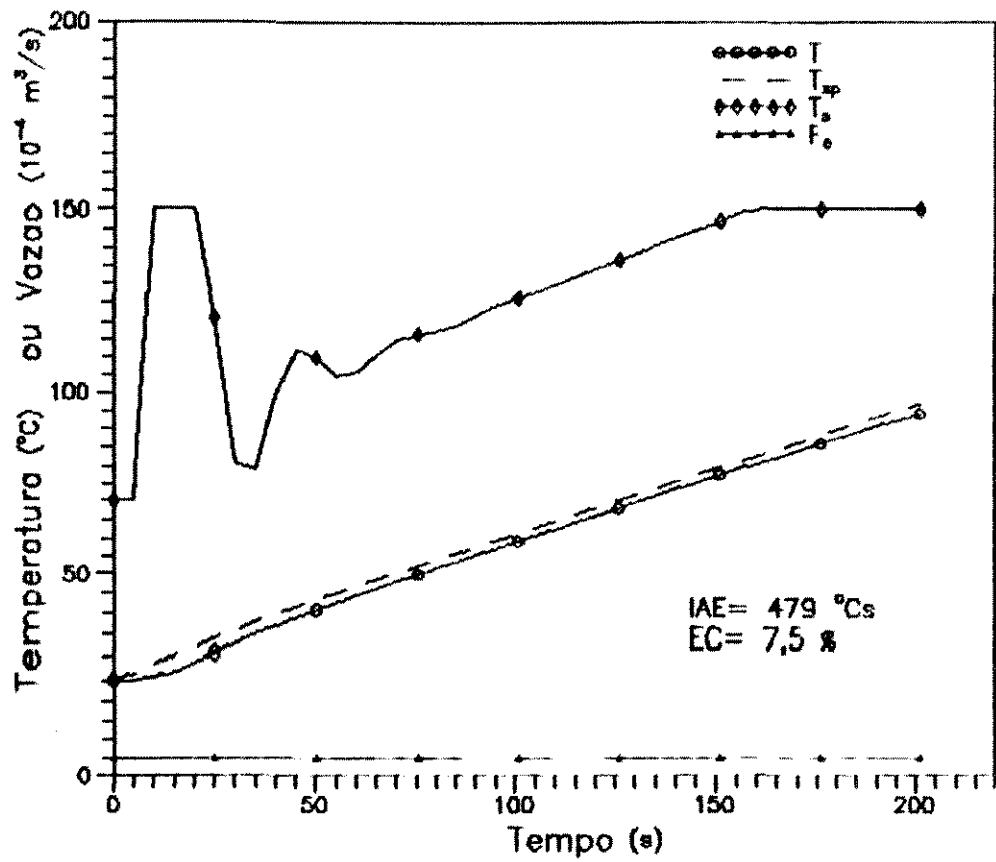


FIGURA 5.2.1 - Comportamento do reator com dinâmica dada pelo conjunto I de parâmetros β , e controlador linear sintonizado pela S.D..

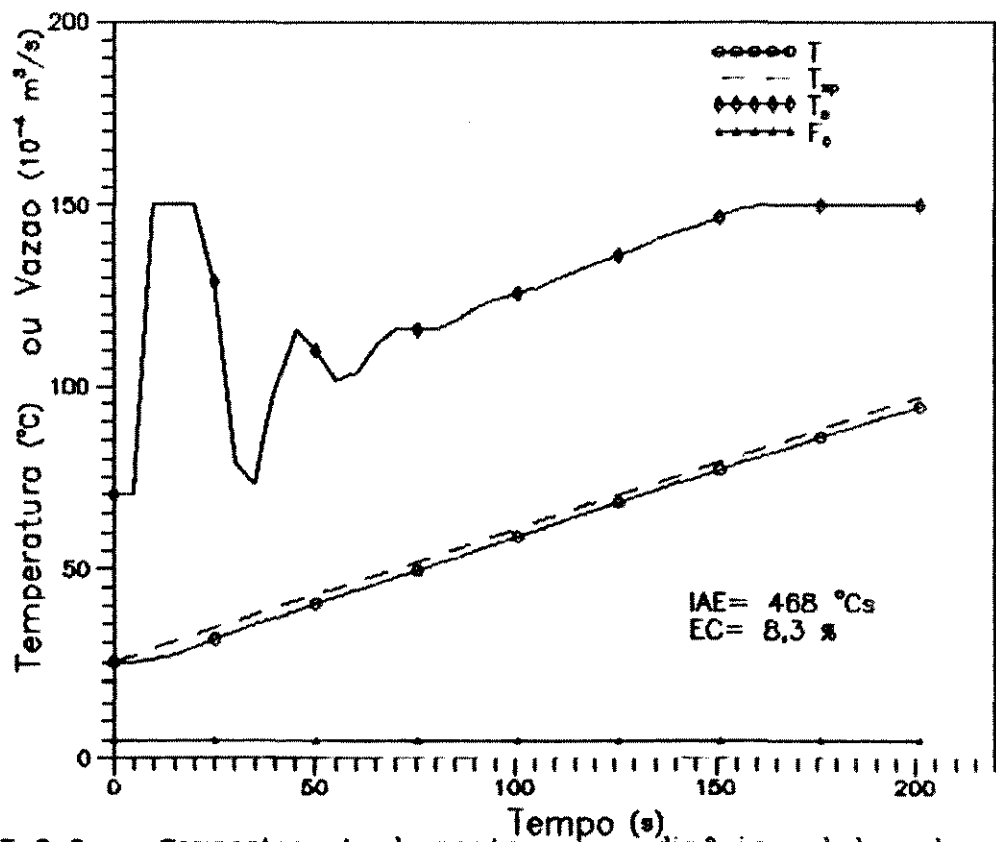


FIGURA 5.2.2 - Comportamento do reator com dinâmica dada pelo conjunto II de parâmetros β , e controlador linear sintonizado pela S.D..

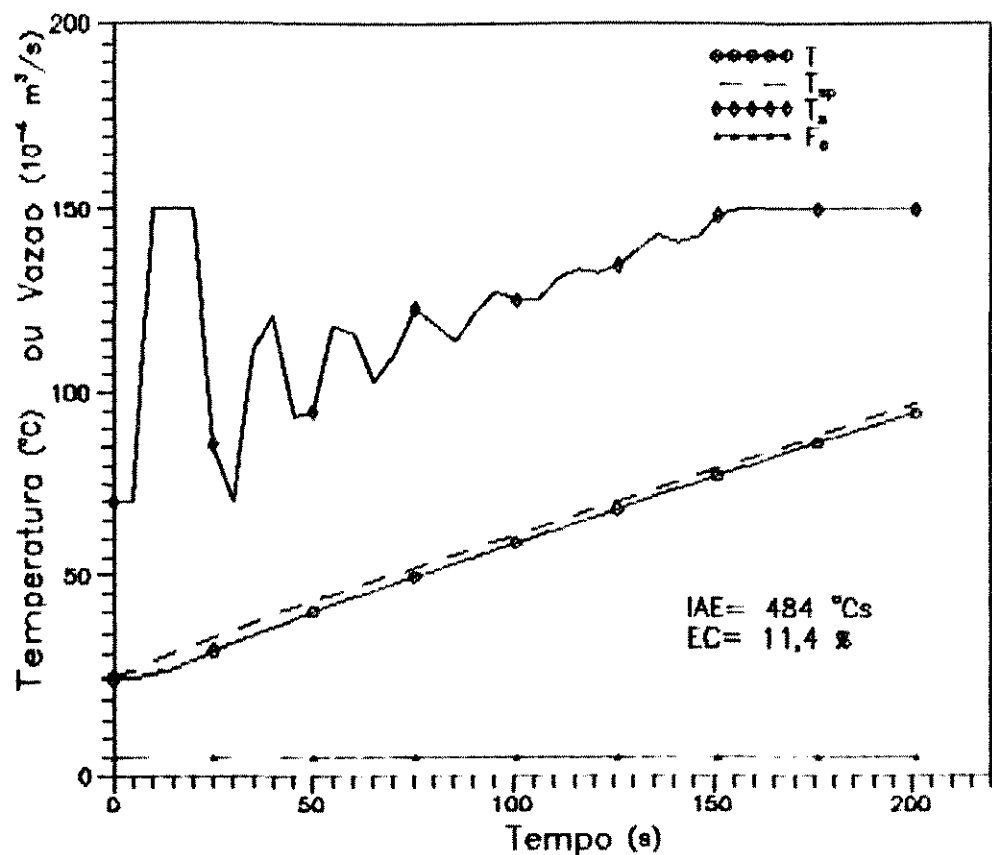


FIGURA 5.2.3 - Comportamento do reator com dinâmica dada pelo conjunto III de parâmetros β , e controlador linear sintonizado pela S.D..

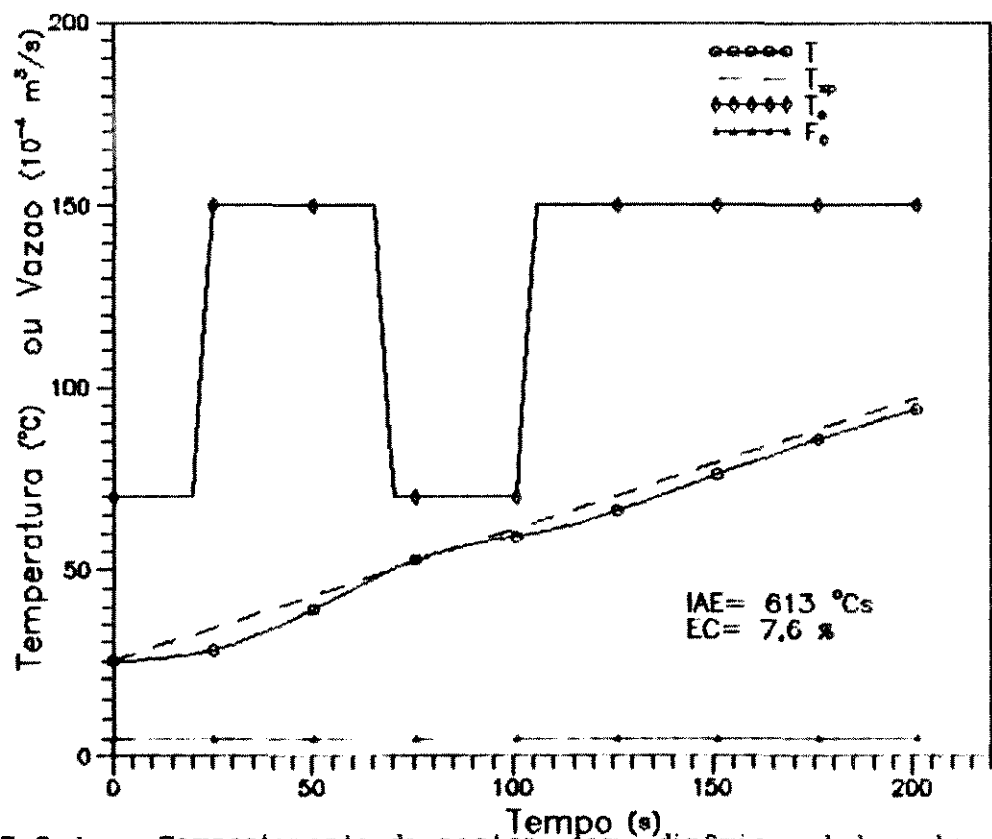


FIGURA 5.2.4 - Comportamento do reator com dinâmica dada pelo conjunto IV de parâmetros β , e controlador linear sintonizado pela S.D..

5.4.1.3 - ESTIMATIVA DA TAXA DO CALOR DE REAÇÃO E DA TEMPERATURA
DA PAREDE DA CAMISA DE VAPOR

A temperatura da parede da camisa de vapor, e a taxa de calor de reação são variáveis que aparecem na leis de controle não-lineares (4.20) e (4.26). A determinação dos valores daquelas variáveis (T_j e Q_r), porém, não é feita aqui por medição direta, mas sim pela solução das equações (4.5) a (4.7), e (4.9).

A taxa do calor de uma reação é função da temperatura do meio, das concentrações iniciais dos reagentes e do valor da massa reacional. A trajetória da temperatura do meio reacional foi distinta entre as 4 simulações que são representadas nas Figuras 5.2.1 a 5.2.4. O perfil real da taxa de calor de reação na etapa de aquecimento do reator, contudo, não se mostrou muito sensível à variação existente no aquecimento dos 4 sistemas considerados. As Figuras 5.3.1 a 5.3.4 apresentam os perfis real e estimado da taxa do calor de reação, assim como os da temperatura da parede da camisa de vapor, associados a resposta de cada uma das 4 malhas GLC estudadas na etapa de aquecimento.

As Figuras 5.3.1 a 5.3.4 mostraram que as trajetórias reais de T_j e Q_r foram praticamente idênticas para a resposta de cada uma das 4 malhas, definidas pelos diferentes conjuntos de parâmetros β .

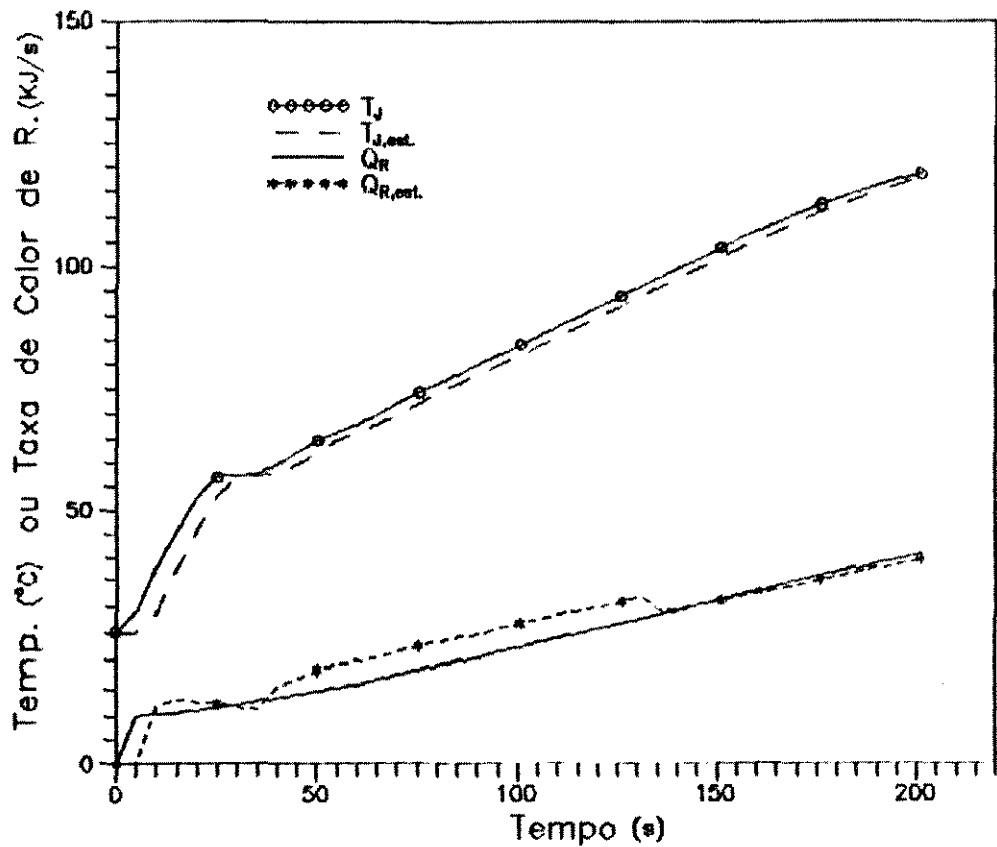


FIGURA 5.3.1 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associada ao comportamento do reator dado na Figura 5.2.1 (conjunto I, e controlador sintonizado pela S.D.).

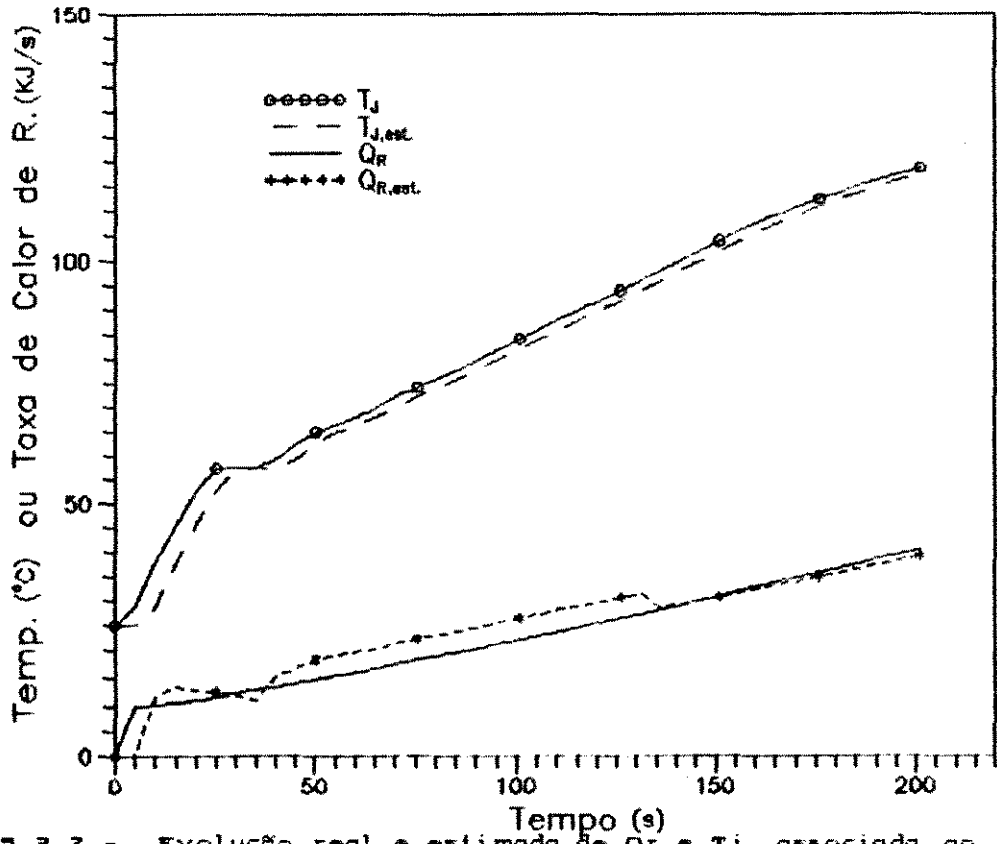


FIGURA 5.3.2 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associada ao comportamento do reator dado na Figura 5.2.2 (conjunto II, e controlador sintonizado pela S.D.).

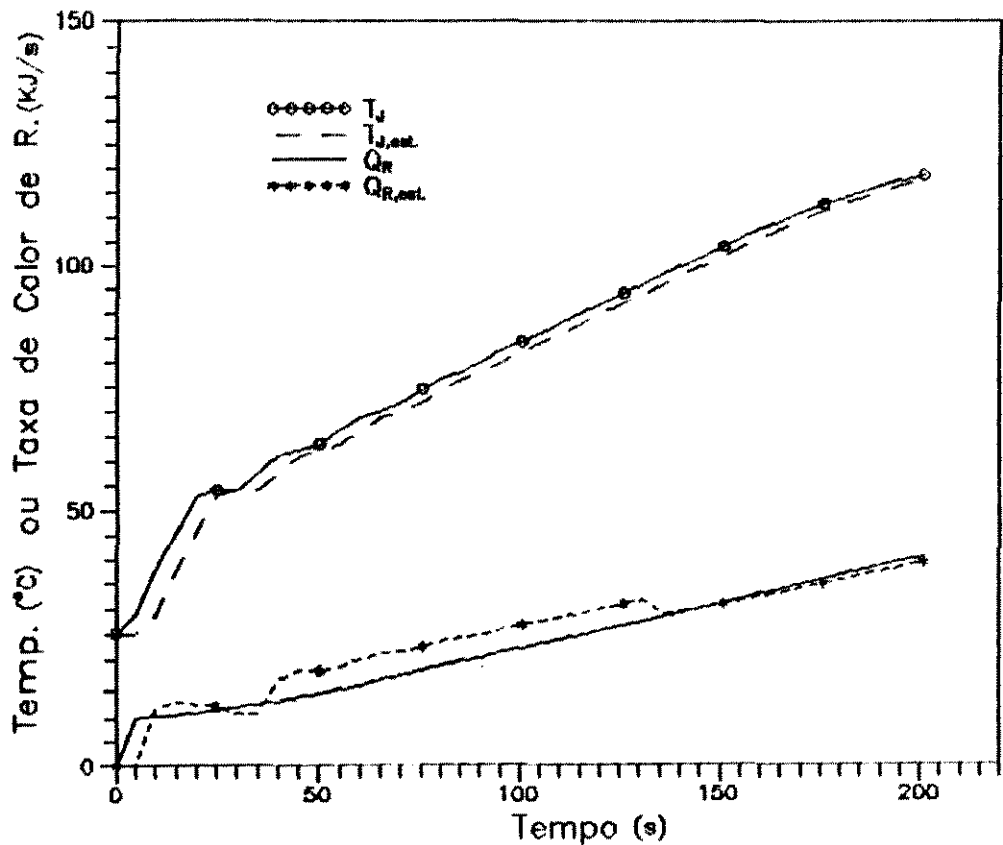


FIGURA 3.3.3 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associada ao comportamento do reator dado na Figura 3.2.3 (conjunto III, e controlador sintonizado pela S.D.).

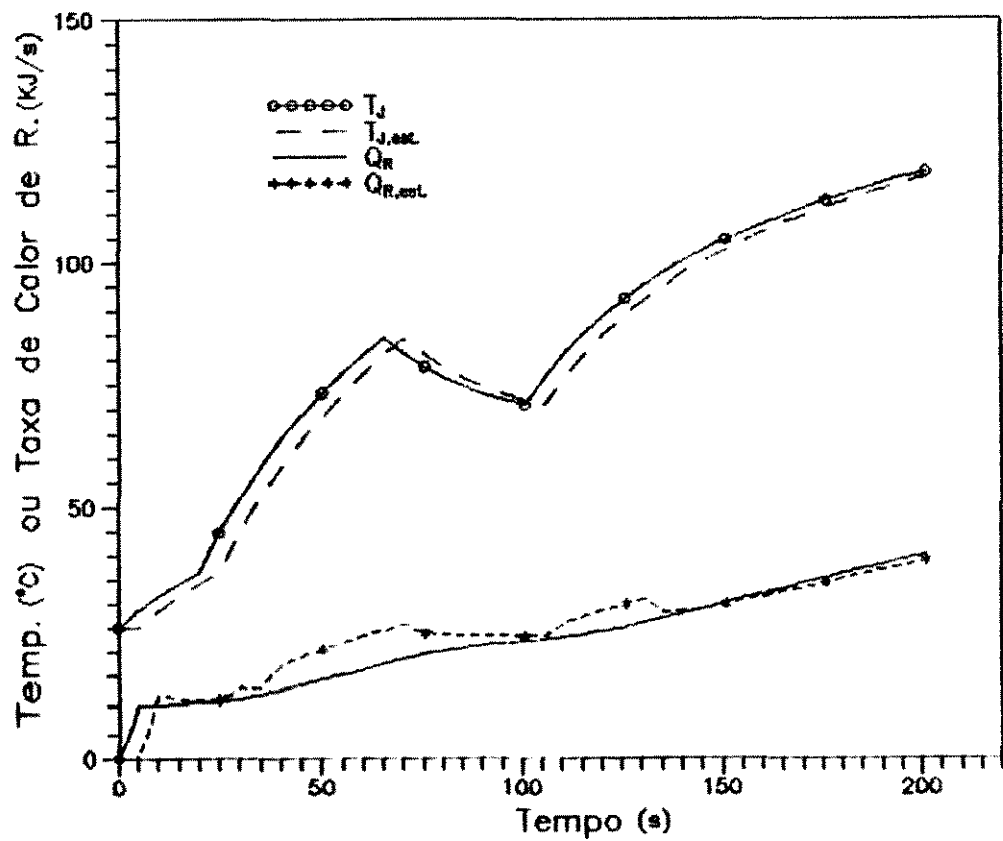


FIGURA 3.3.4 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associadas ao comportamento do reator dado na Figura 3.2.4 (conjunto IV, e controlador sintonizado pela S.D.).

5.4.1.4 - ANÁLISE DO DESEMPENHO DAS MALHAS GLC

A resposta das malhas de controle para os 4 conjuntos considerados para representar o processo na etapa de aquecimento do reator (Figuras 5.2.1 a 5.2.4) mostra que os controladores lineares das malhas de controle GLC não estão satisfatoriamente sintonizados.

Mantendo-se o ganho do controlador linear igual ao encontrado pela S.D., para cada sistema, e variando-se os valores de τ_{I1} e τ_{D1} , é possível a análise da influência destes parâmetros no desempenho das malhas. As figuras 5.4.1 a 5.4.4 expõem as curvas de variação do IAE com relação a τ_{I1} , para diversos valores de τ_{D1} , para cada uma das 4 malhas GLC consideradas na etapa de aquecimento do reator.

As Figuras 5.4.1 a 5.4.4 mostram, como esperado, que a constante de tempo derivativa (τ_{D1}) e a constante de tempo integral (τ_{I1}) do controlador linear são parâmetros que afetam o desempenho das malhas de controle GLC. A influência de τ_{D1} sobre o valor de IAE pouco se fez notar quando seu valor estava situado nas vizinhanças daquele definido pela S.D. para cada conjunto de β 's. Ao contrário, o parâmetro τ_{I1} implicou em efeito bastante intenso sobre o valor do IAE. Observa-se ainda que, para os 4 conjuntos em questão, os valores de τ_{I1} dados pela S.D. estão longe daqueles que tornam mínimo o IAE da respectiva malha. Na Tabela 5.3 são apresentados os valores ótimos dos parâmetros do controlador linear de cada uma das 4 malhas, definidas a

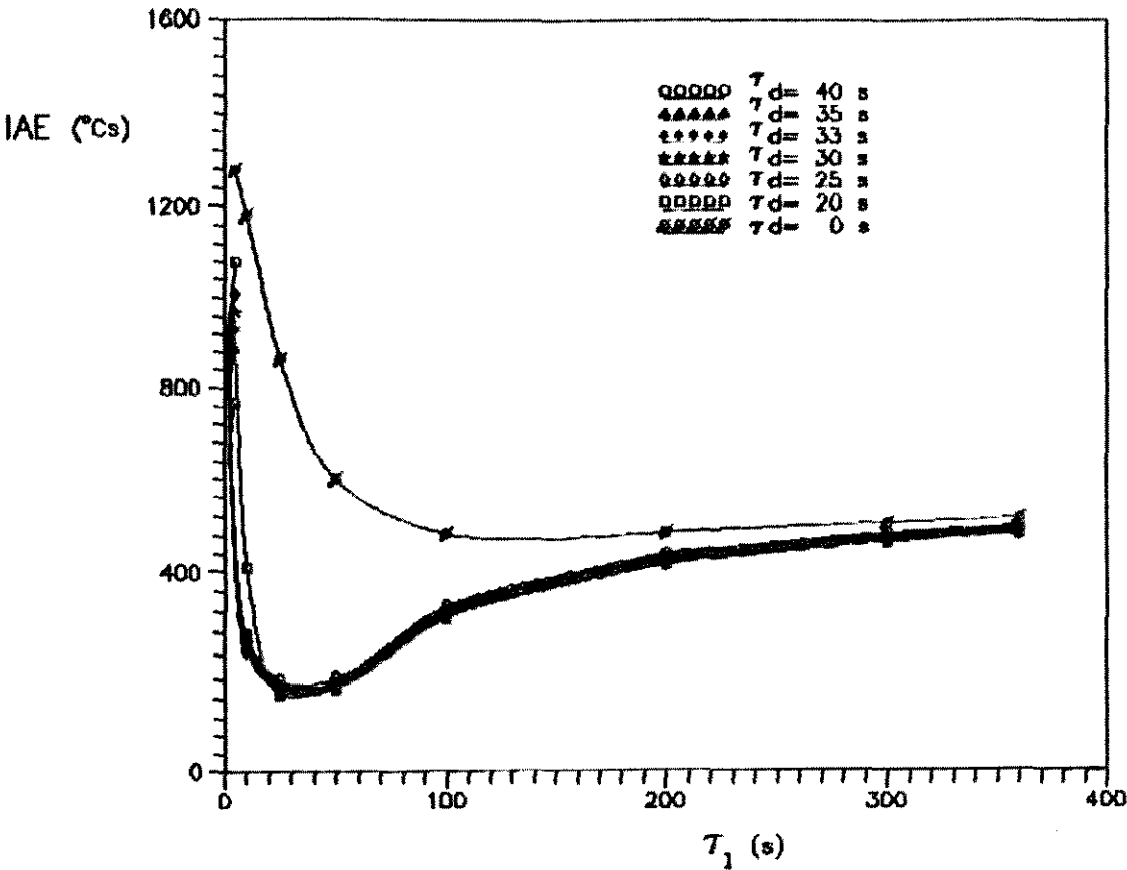


FIGURA 3.4.1 - Evolução do IAE em função de T_1 e T_d , com K_{C1} da do pela S.D., com a dinâmica do processo definida pelo conjunto I de parâmetros β .

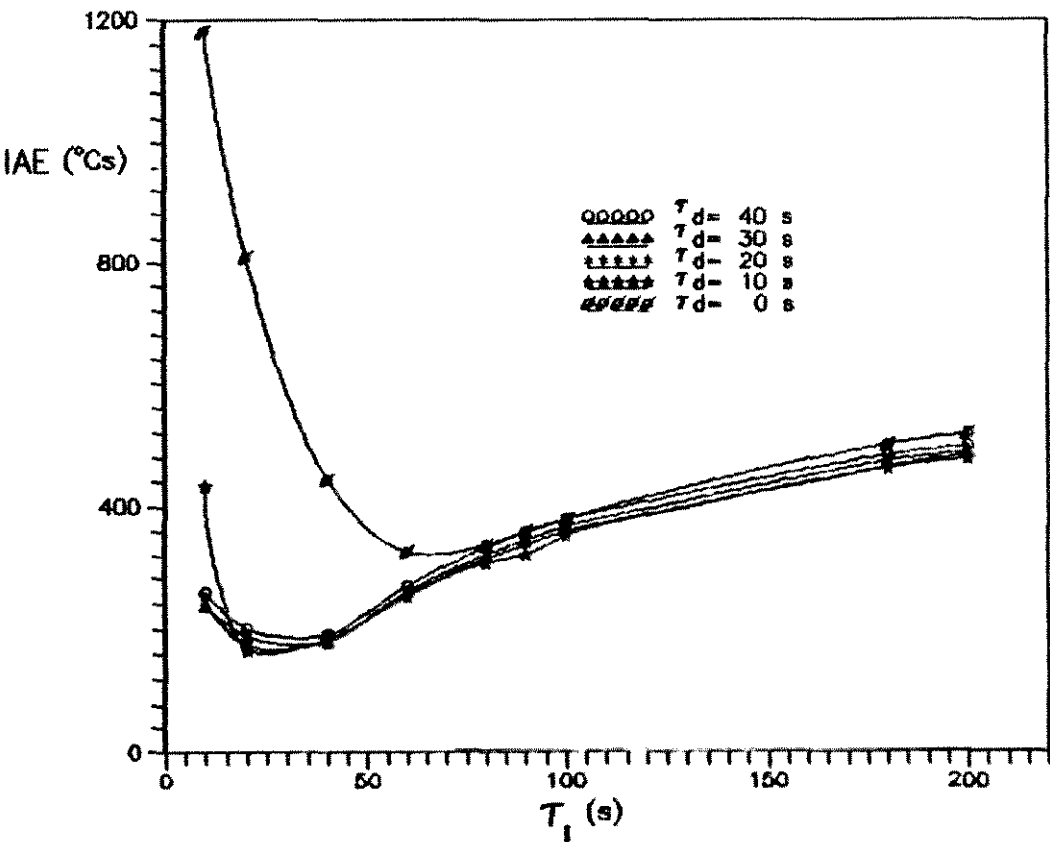


FIGURA 3.4.2 - Evolução do IAE em função de T_1 e T_d , com K_{C1} da do pela S.D., com a dinâmica do processo definida pelo conjunto II de parâmetros β .

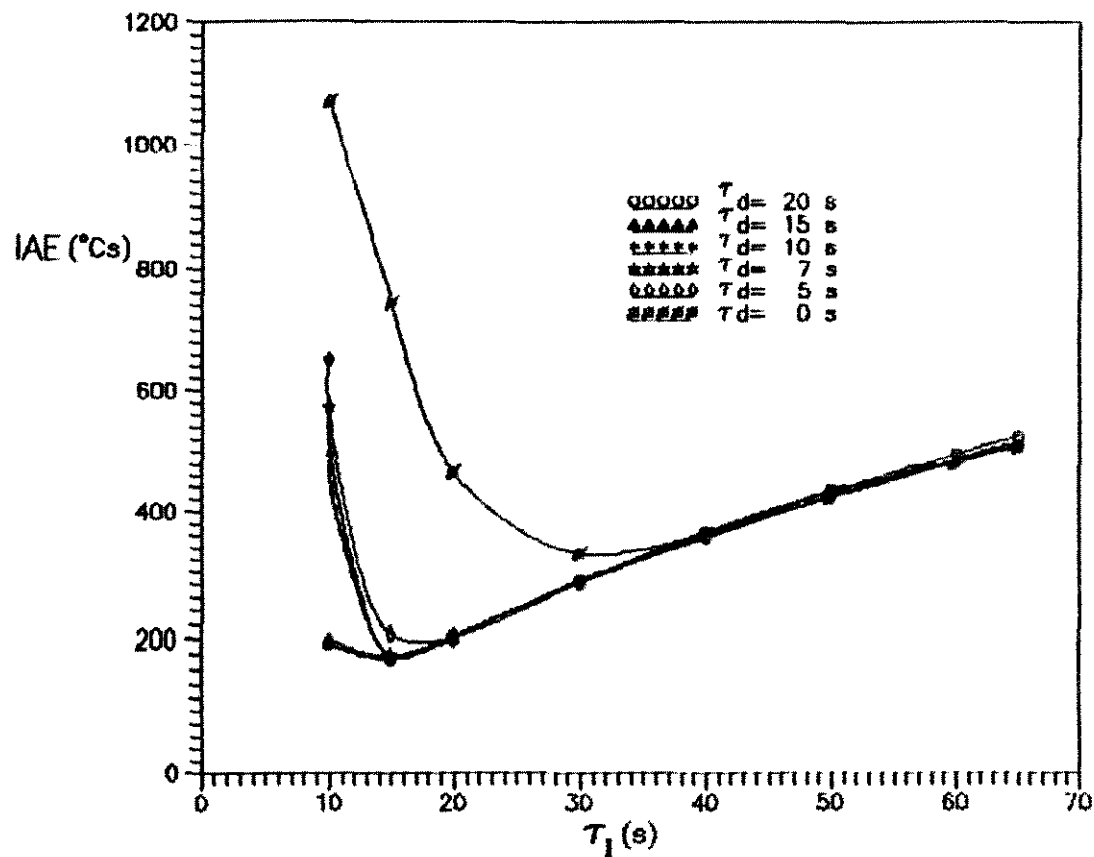


FIGURA 5.4.3 - Evolução do IAE em função de T_I e T_d , com K_{C1} da do pela S.D., com a dinâmica do processo definida pelo conjunto III de parâmetros β .

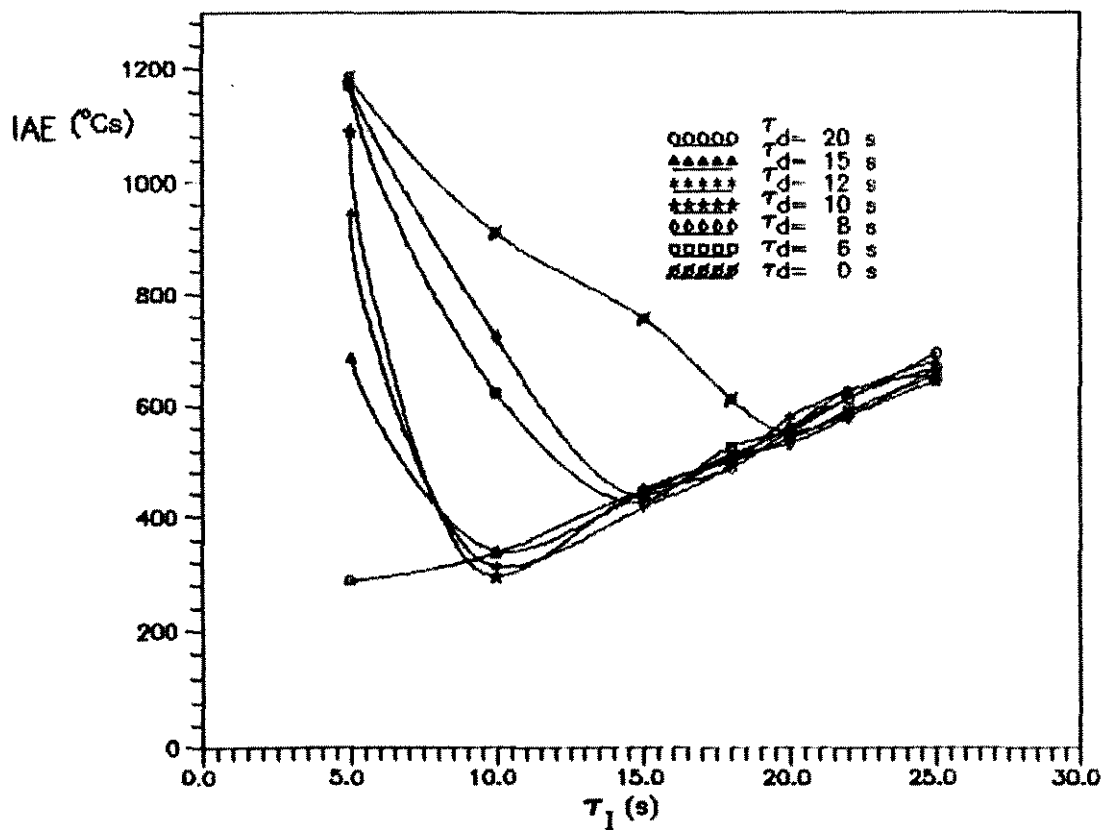


FIGURA 5.4.4 - Evolução do IAE em função de T_I e T_d , com K_{C1} da do pela S.D., com a dinâmica do processo definida pelo conjunto IV de parâmetros β .

partir dos 4 conjuntos de valores de β 's, juntamente com os índices de avaliação de desempenho IAE e EC correspondentes a esta sintonização.

TABELA 5.3 - Parâmetros ótimos de sintonização do controlador linear de cada malha, e os valores dos índices de desempenho correspondentes. Obs.: O ganho K_c de cada malha é igual àquele dado pela S.D. (Tabela 5.2).

Malha	$\tau_{I1,ót} (s)$	$\tau_{D1,ót} (s)$	IAE (Cs)	EC (%)
Conj. I	25	20	171	5,4
Conj. II	20	10	169	7,6
Conj. III	15	20	174	25,9
Conj. IV	5	20	290	7,6

A comparação entre os dados expostos nas Tabelas 5.2 e 5.3 mostra que o desempenho de cada uma das 4 malhas pode ser bastante melhorado com a sintonização adequada do controlador linear. A Tabela 5.3 mostra ainda que a resposta da malha que teve o menor valor de IAE, dentre todas as simulações realizadas com os 4 sistemas, ocorreu quando a dinâmica do processo é representada pelo conjunto II de parâmetros β , sendo o valor de IAE igual a 169 °Cs. A representação do comportamento do sistema para estas condições dada na Figura 5.5.1, com as trajetórias reais e estimadas de T_j e Q_r iguais às que aparecem na Figura 5.5.2.

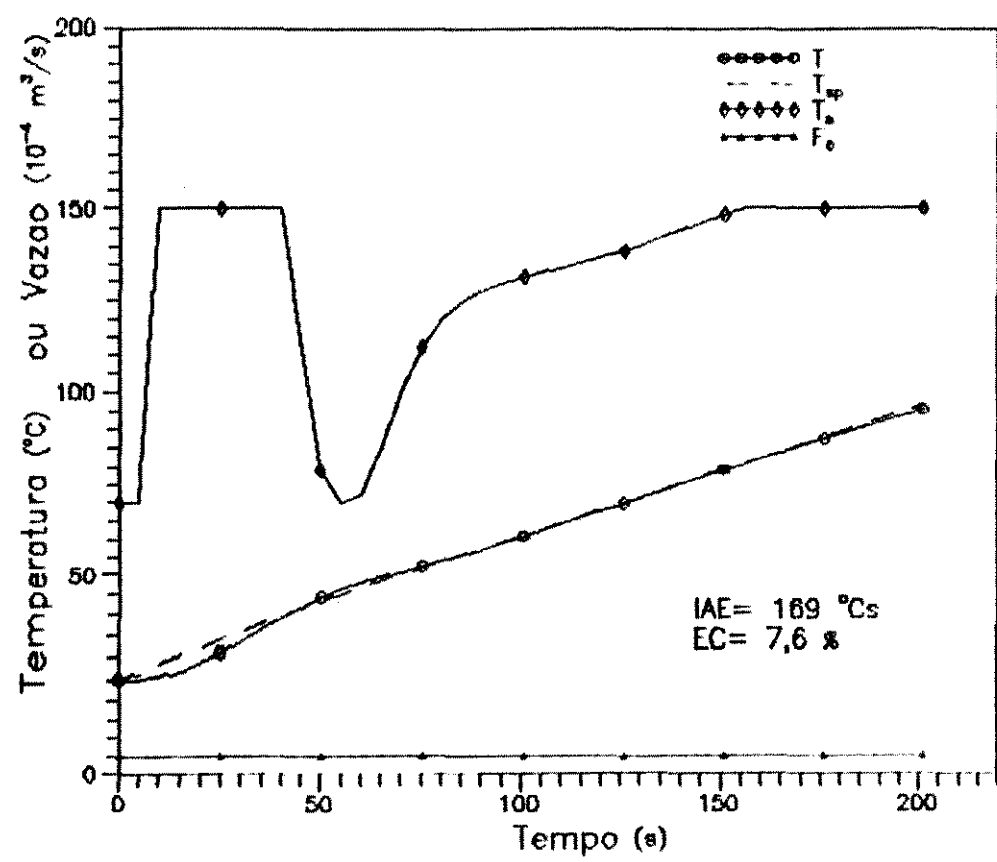


FIGURA 5.5.1 - Comportamento do reator que resulta em IAE mínimo da malha de controle OLC. Condições: Conjunto II de β ; $K_{C1} = 0,36$, $\tau_{I1} = 20 \text{ s}$, e $\tau_{D1} = 10 \text{ s}$.

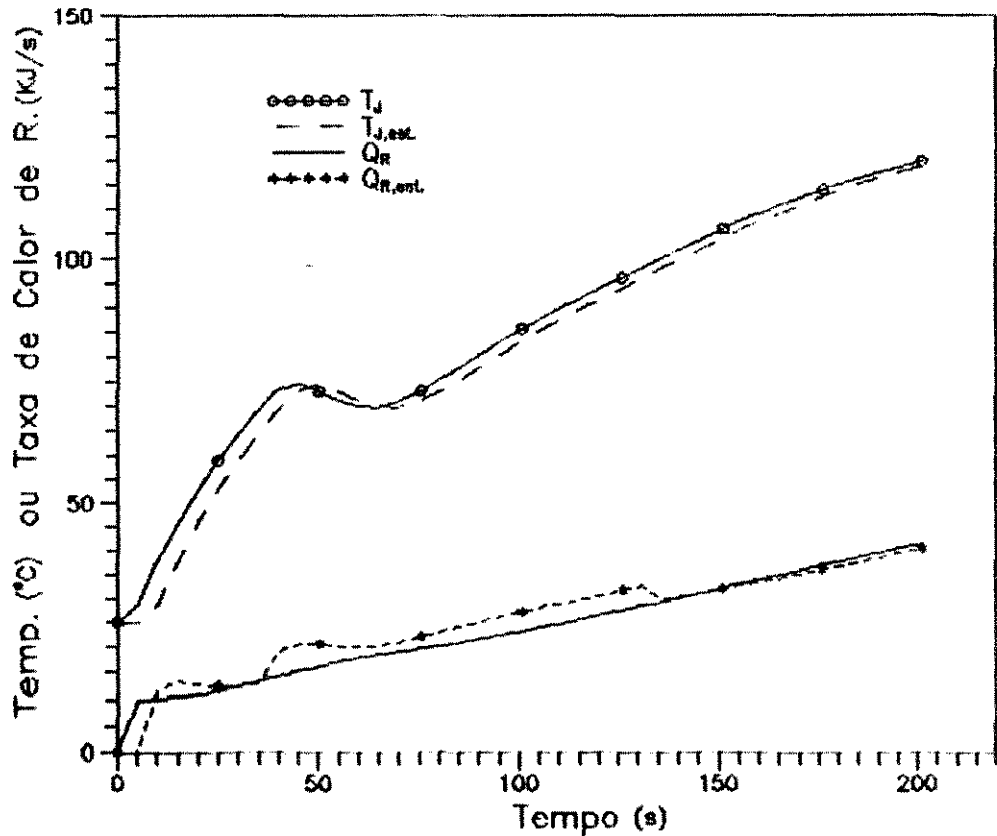


FIGURA 5.5.2 - Evolução real e estimada de Q_r e T_j associada ao comportamento do reator dado na Figura 5.5.1.

5.4.1.5 - RESPOSTAS ÓTIMAS DAS 4 MALHAS GLC, NA ETAPA DE
AQUECIMENTO

A malha de controle GLC, tal como mostra a Figura 5.1, pode ser representada de forma simplificada por uma típica malha de controle "feedback" da variável controlada, na qual existem apenas as funções de transferência do controlador linear e do processo.

Pelo que foi afirmado no parágrafo anterior, é de se esperar que, na hipótese de ser modificado o ganho da função de transferência do processo (função esta obtida pela linearização do modelo no sentido entrada(v)/saída(y)), preservando-se os outros parâmetros, a resposta da malha GLC permaneça inalterada, desde que o ganho do controlador linear seja alterado de forma que o produto $K_{c1} K_{p1}$ seja mantido constante.

Para as simulações realizadas nas condições das malhas dispostas na Tabela 5.3 o ganho do processo foi sempre constante (e igual 100). Assim, se para cada malha o único parâmetro variado for o ganho do processo, e a esta mudança corresponder uma simples alteração do ganho do controlador linear, para manter constante o produto $K_{c1} K_{p1}$, a resposta de cada uma delas permanece inalterada. Isto pode ser visto na Figura 5.6. Nelas vê-se que ao serem variados os ganhos do processo para cada um dos 4 conjuntos definidos na tabela 5.1, bastou que se modificasse o ganho do controlador linear de modo a manter o produto $K_{c1} K_{p1}$ constantes, (com τ_{I1} e τ_{D1} iguais mantidos fixos, e iguais àqueles dados na Tabela 5.3), para que os valores de IAE e EC fossem mantidos os

mesmos para cada conjunto de parâmetros estudado.

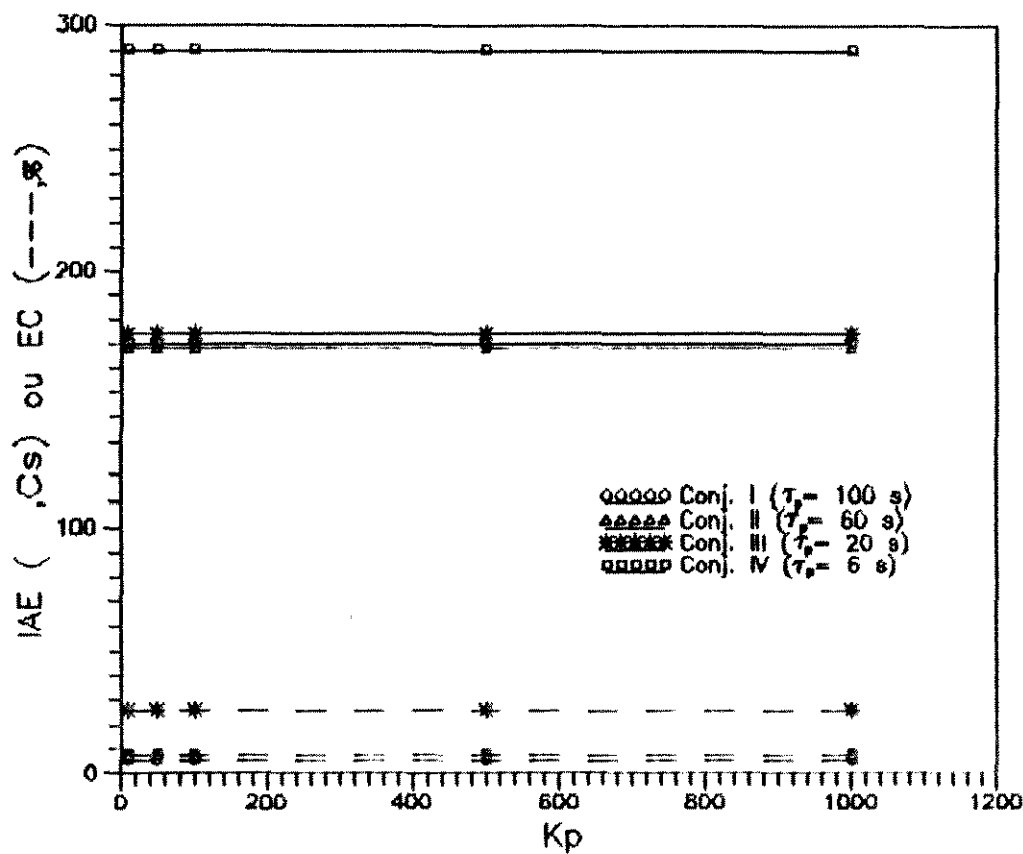


FIGURA 3.6 - Influência da variação de K_p sobre o desempenho das malhas GLC, definidas por cada um dos 4 diferentes conjuntos de β , quando o produto $K_{c1} K_{p1}$ é mantido constante.

Os resultados mostrados na Figura 3.6 possibilitam a verificação de que a lei de controle dada pela equação (4.17) lineariza de forma exata a dinâmica do processo na etapa em questão, exatamente como afirmam os autores do método GLC de controle.

5.4.2 - CONTROLE DE TEMPERATURA DO REATOR NA ETAPA DE
RESFRIAMENTO5.4.2.1 - DESCRIÇÃO DOS SISTEMAS CONSIDERADOS PARA REPRESENTAR A
DINÂMICA DO PROCESSO

A função de transferência, oriunda da linearização do modelo do processo no sentido entrada/saída, para esta etapa do processo é expressa pela equação (5.2) que define um sistema de 1^ª ordem, com os seguintes parâmetros:

$$K_{p2} = \frac{1}{\beta_{02}} \quad (5.18)$$

$$\tau_{p2} = \frac{\beta_{12}}{\beta_{02}} \quad (5.19)$$

Da mesma forma como foi feito anteriormente para a etapa de aquecimento, foram definidos aqui 4 conjuntos de parâmetros β 's do processo. Estes conjuntos originam 4 diferentes dinâmicas de processo para representar a etapa de resfriamento do reator. Na Tabela 5.4 é feita a correspondência entre os conjuntos $(\beta_{02}; \beta_{12})$ e os parâmetros do processo escolhidos.

TABELA 5.4 - Descrição dos 4 conjuntos considerados representar o processo na etapa de resfriamento do reator. Obs.: $[\beta_{12}] = [\tau_{p2}] = s$; $[\beta_{02}] = [K_{p2}] = 1$.

		β_{02}	β_{12}	τ_{p2}	K_{p2}
Conj.	I	10^{-2}	1	100	100
Conj.	II	10^{-2}	0,6	60	100
Conj.	III	10^{-2}	0,2	20	100
Conj.	IV	10^{-2}	0,06	6	100

5.4.2.2 - PRÉ-SINTONIZAÇÃO DA MALHA DE CONTROLE GLC PELO MÉTODO DA SÍNTESE DIRETA PARA OS 4 CONJUNTOS DE PARÂMETROS

Na seção 5.2.2 foram definidos os parâmetros do controlador linear para compor a malha GLC que atua na etapa de resfriamento do reator, com as funções de transferência da malha fechada e do processo descritas pelas equações (5.3) e (5.2), respectivamente. As equações (5.11) e (5.12) permitem concluir que o controlador linear projetado pela S.D. para a malha de controle em questão deve ser do tipo PI.

Os valores dos parâmetros do controlador linear, K_{cz} e τ_{12} , determinados para cada um dos conjuntos são mostrados na Tabela 5.5. Ela expõe ainda os valores de IAE e EC encontrados na resposta de cada uma das malhas, para toda a etapa de resfriamento do reator.

TABELA 5.5 - Descrição dos parâmetros do controlador linear obtido pela S.D., associado a cada conjunto, e medidas do IAE e do EC para a resposta de cada uma das malhas.

	K_{c2}	τ_{12} (s)	IAE(°Cs)	EC(%)
Conj. I	0,2	100	420	0,18
Conj. II	0,12	60	489	0,32
Conj. III	0,04	20	584	0,31
Conj. IV	0,012	6	920	0,48

O comportamento do reator nos primeiros 300 segundos da etapa de resfriamento para cada uma das 4 malhas definidas na Tabela 5.5 é representado nas Figuras 5.7.1 a 5.7.4.

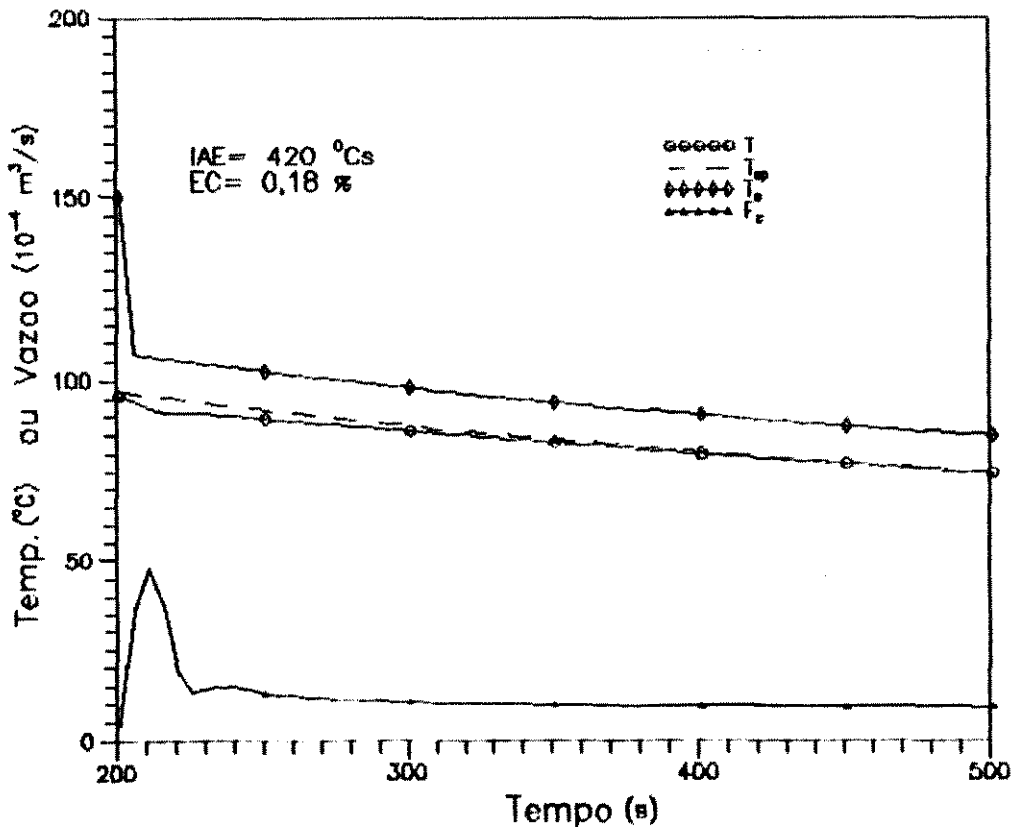


FIGURA 5.7.1 - Comportamento do reator para $200 \leq t \leq 500$ s, com a dinâmica do processo dada pelo conjunto I, nesta etapa, e o controlador sintonizado pela S.D..

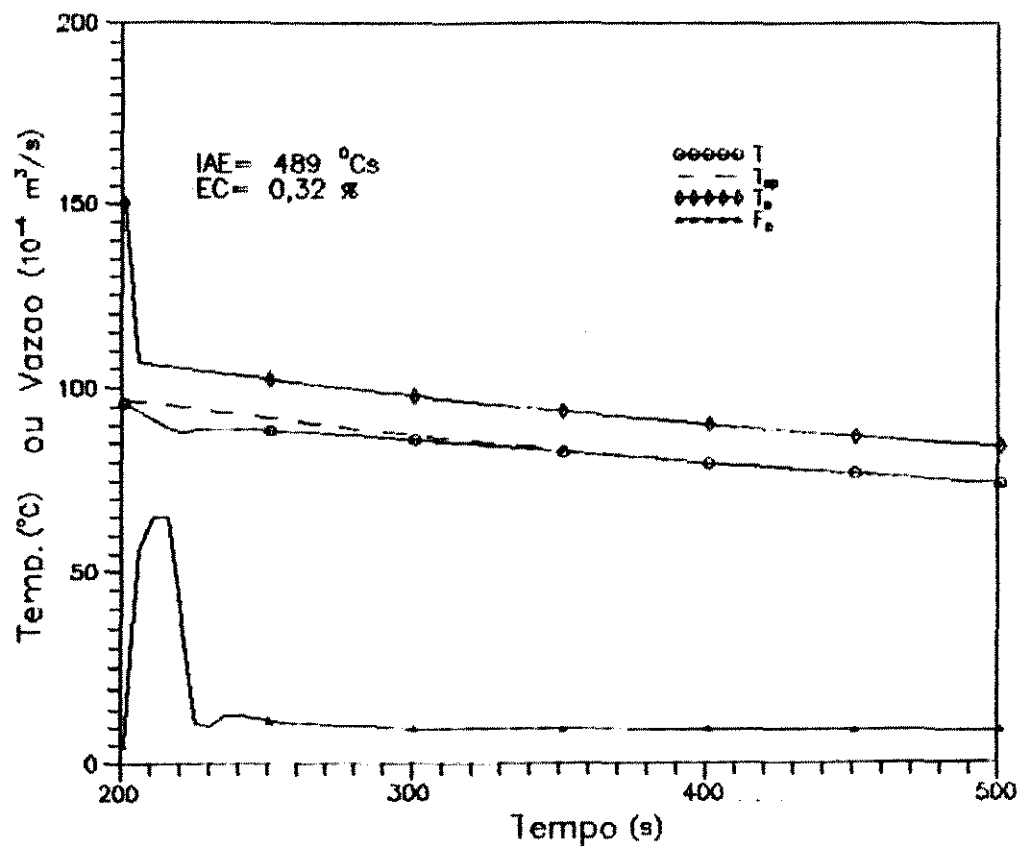


FIGURA 5.7.2 - Comportamento do reator para $200 \leq t \leq 500$ s, com a dinâmica do processo dada pelo conjunto II, nesta etapa, e o controlador sintonizado pela S.D..

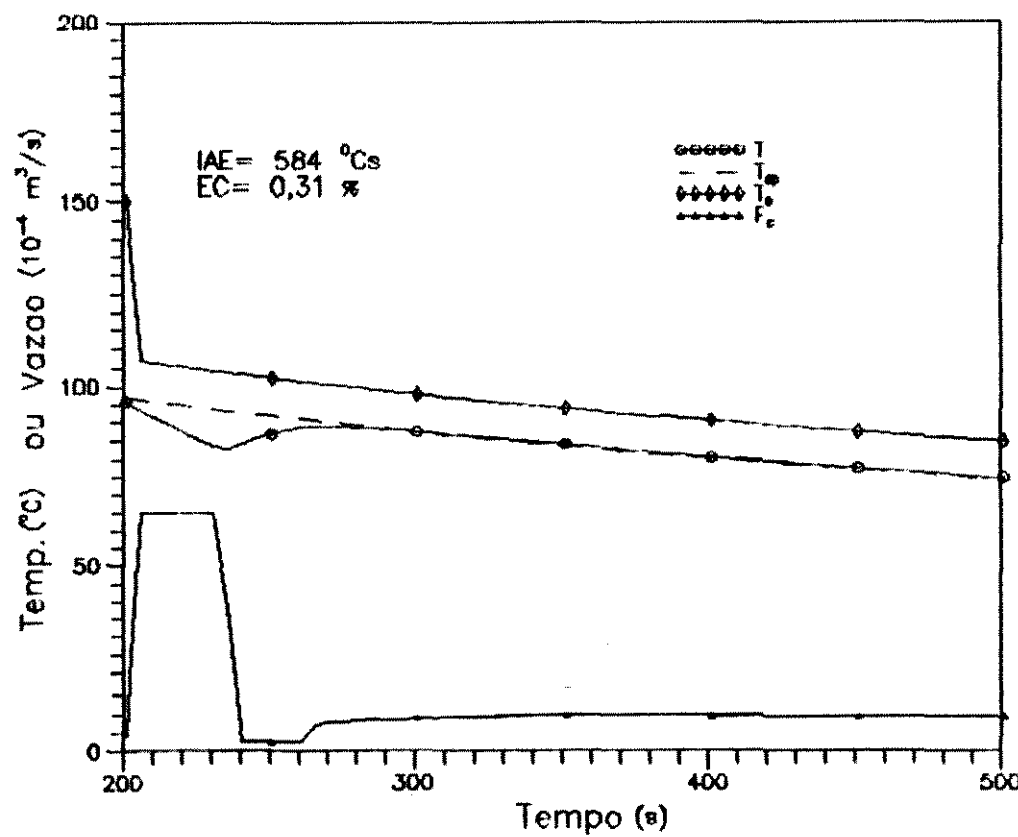


FIGURA 5.7.3 - Comportamento do reator para $200 \leq t \leq 500$ s, com a dinâmica do processo dada pelo conjunto III, nesta etapa, e o controlador sintonizado pela S.D..

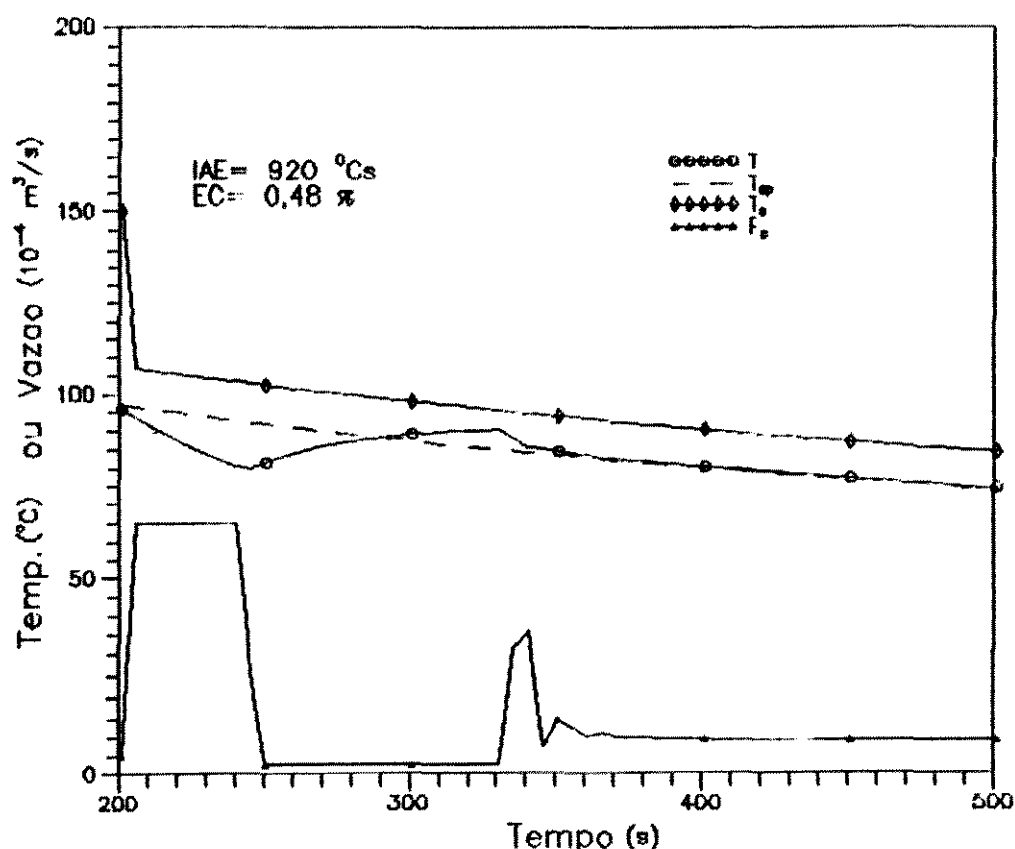


FIGURA 5.7.4 - Comportamento do reator para $200 \leq t \leq 500$ s, com a dinâmica do processo dada pelo conjunto IV, nesta etapa, e o controlador sintonizado pela S.D..

5.4.2.3 - ESTIMATIVA DA TAXA DO CALOR DE REAÇÃO E DA TEMPERATURA DA PAREDE DA CAMISA DE VAPOR

Na etapa de resfriamento do reator a estimativa da temperatura da parede da camisa de vapor e da taxa do calor de reação continua sendo feita pela solução das equações (4.5) a (4.7) e (4.9).

A evolução de Q_r e T_j ao longo da etapa de resfriamento correspondente às 4 diferentes respostas dadas nas Figuras 5.7.1 a 5.7.4 é vista nas Figuras 5.8.1 a 5.8.4.

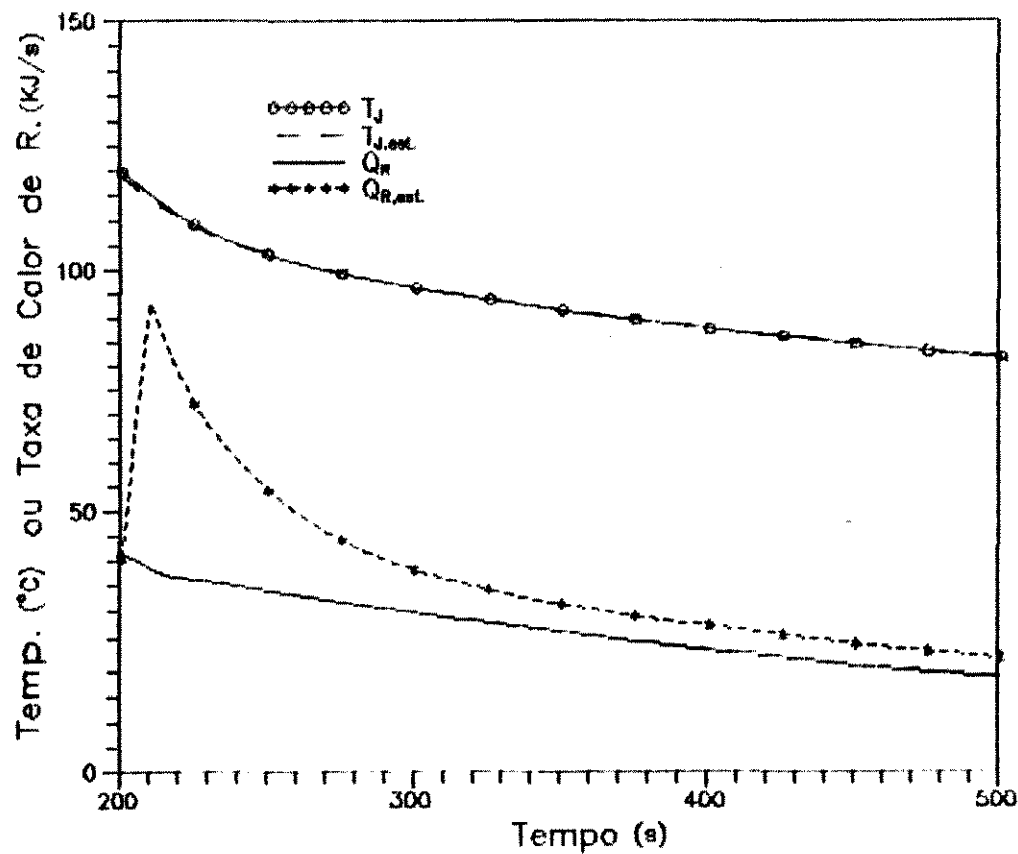


FIGURA 5.8.1 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associada ao comportamento do reator dado na Figura 5.7.1 (conjunto I, e controlador sintonizado pela S.D.).

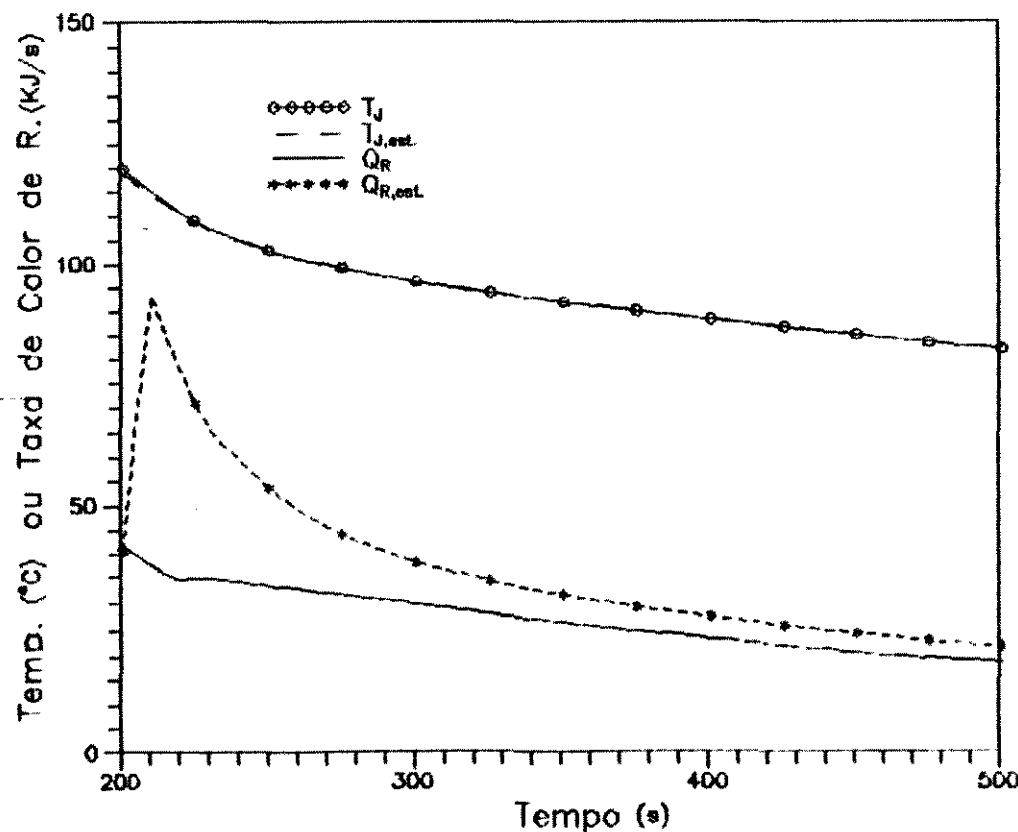


FIGURA 5.8.2 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associadas ao comportamento do reator dado na Figura 5.7.2 (conjunto II, e controlador sintonizado pela S.D.).

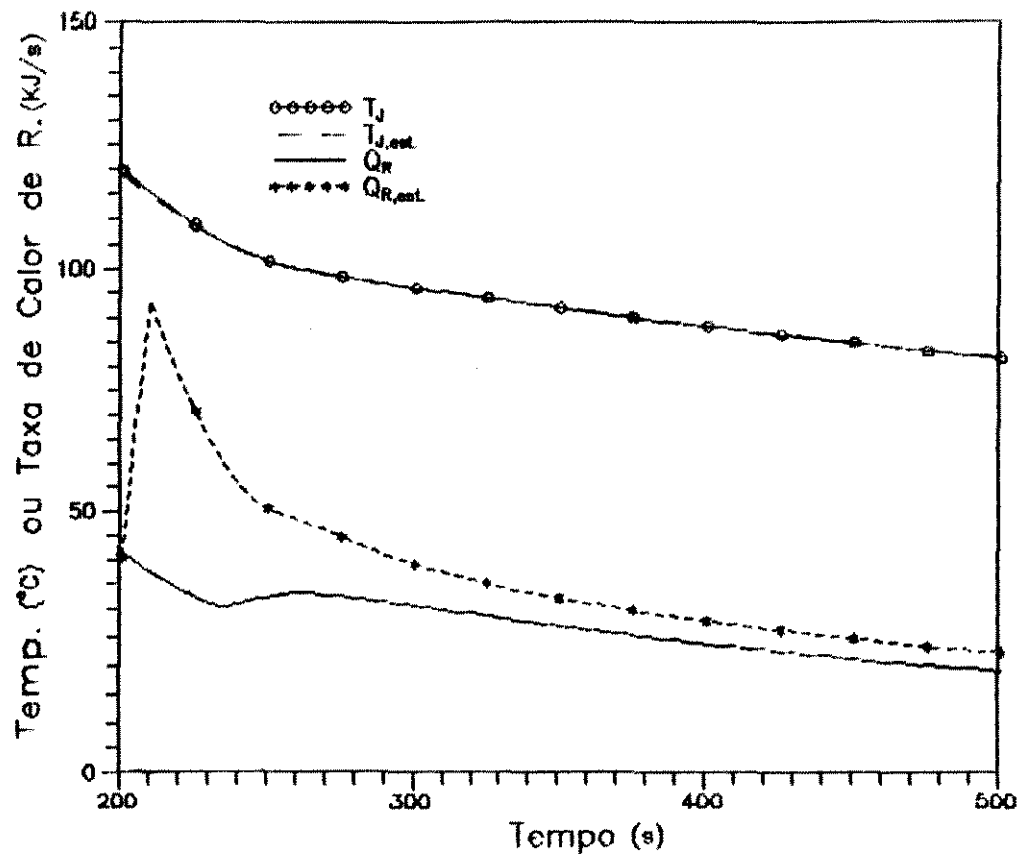


FIGURA 5.8.3 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associadas ao comportamento do reator dado na Figura 5.7.3 (conjunto III, e controlador sintonizado pela S.D.).

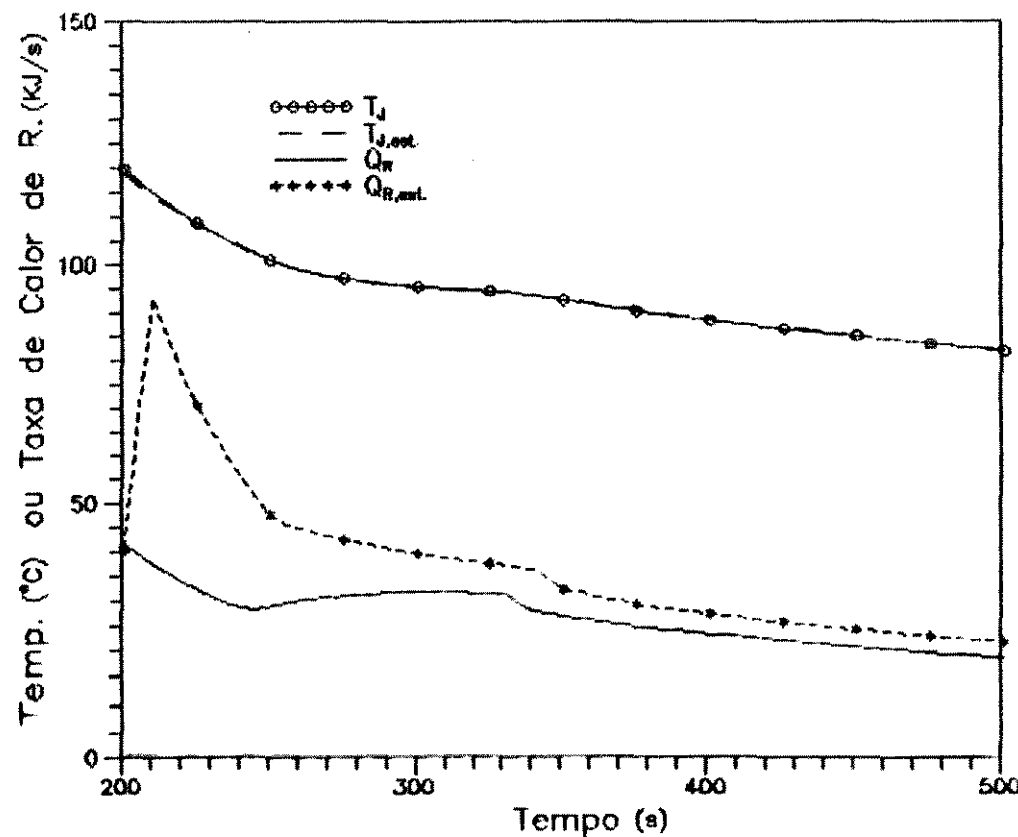


FIGURA 5.8.4 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associadas ao comportamento do reator dado na Figura 5.7.4 (conjunto IV, e controlador sintonizado pela S.D.).

5.4.2.4 - ANÁLISE DO DESEMPENHO DAS MALHAS GLC

De modo a se investigar a qualidade da sintonização feita pela S.D. para cada uma das 4 malhas GLC consideradas na etapa de resfriamento do reator, procedeu-se da seguinte forma: Com os parâmetros do processo dados na Tabela 5.4 para cada malha, variou-se a constante de tempo integral do controlador linear (τ_{I2}), preservando-se o valor do ganho (K_{c2}) como aquele obtido pela S.D. (Tabela 5.5), e acompanhou-se a evolução do valor do IAE. Com os resultados encontrados pode-se determinar o valor de τ_{I2} capaz de minimizar o IAE em cada malha, como mostra a Figura 5.9.

A Figura 5.9 permite concluir que o parâmetro τ_{I2} do controlador linear afeta significativamente o desempenho da malha GLC em todos os 4 conjuntos definidos para a etapa de resfriamento do reator.

Na Tabela 5.6 são dados, para cada malha, os valores dos parâmetros K_{c2} e τ_{I2} correspondentes ao desempenho ótimo da mesma, acompanhados dos respectivos valores dos índices de análise de desempenho, IAE e EC.

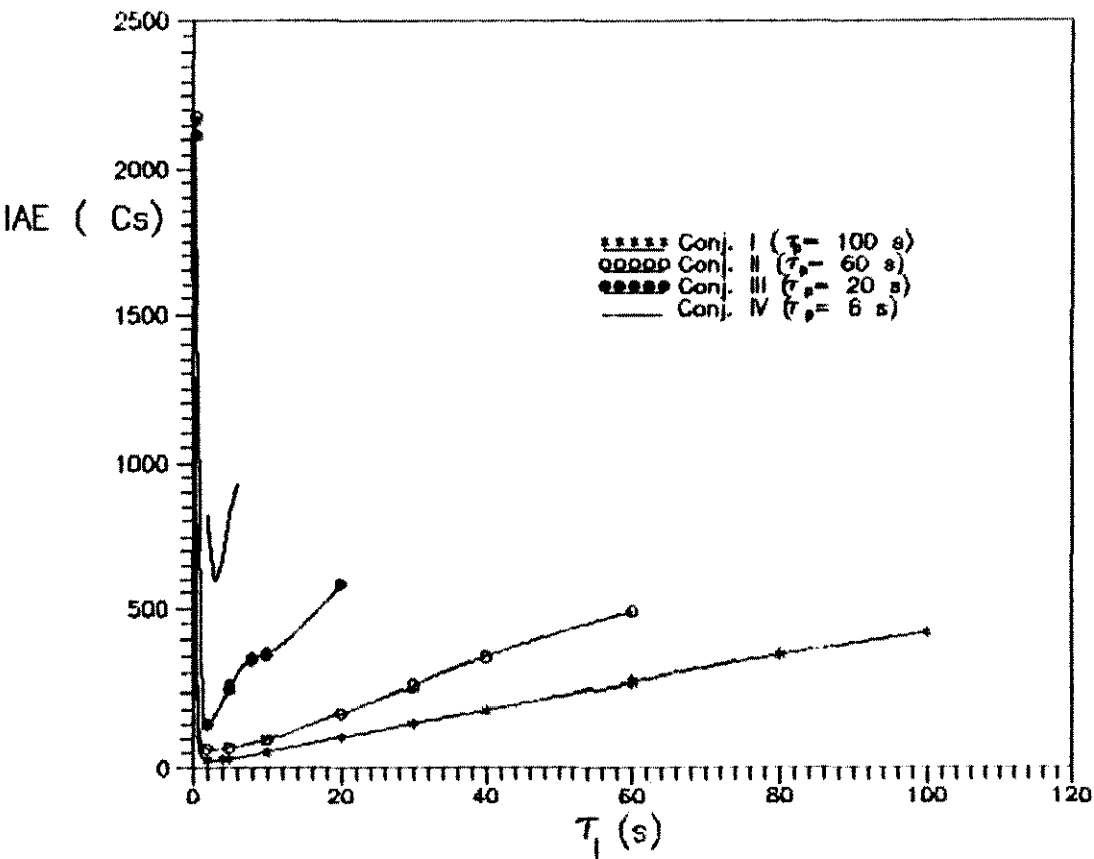


FIGURA 3.9 - Evolução do IAE em função de T_1 , com K_{c2} dado pela S.D., para cada uma das 4 malhas definidas a partir dos diferentes conjuntos de parâmetros β , considerados na etapa de resfriamento do reator.

TABELA 3.6 - Descrição dos parâmetros do controlador linear que resultam em desempenho ótimo (IAE mínimo) da malha GLC para cada conjunto de parâmetros, e os valores de IAE e EC correspondente à cada uma delas.

MALHA	K_{c2} (S.D.)	$\tau_{12, \text{ót}} (s)$	IAE (Cs)	EC (%)
Conj. I	0,2	2	26	0,4
Conj. II	0,12	2	65	0,7
Conj. III	0,04	2	149	1,1
Conj. IV	0,012	3	593	6,1

Dentre todas as simulações realizadas para que se construísse

a Figura 5.9, aquela que resultou na resposta da malha de controle com melhor desempenho ocorreu para o processo representado pelo conjunto I com os parâmetros correspondentes do controlador linear apresentados na Tabela 5.6. A resposta da malha de controle assim definida é vista na Figura 5.10.1, enquanto que a estimativa da taxa do calor de reação e da temperatura da camisa de vapor a ela associada é dada na Figura 5.10.2.

Embora para a simulação cujos resultados são vistos na Figura 5.10.1 a resposta da malha tenha resultado em IAE mínimo, foi

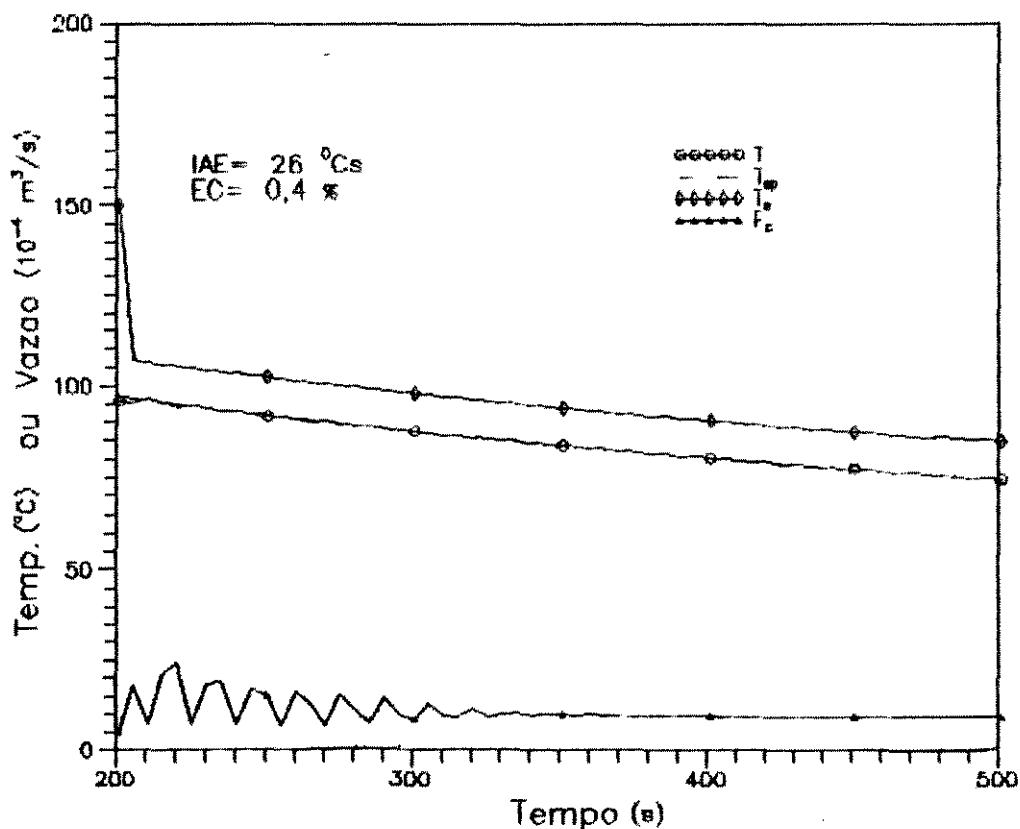


FIGURA 5.10.1 - Comportamento do reator que resulta em IAE mínimo da malha de controle GLC na etapa de resfriamento. Condições: Conj. I de β ; $K_{G2} = 0,2$, $\tau_{I2} = 2$ s.

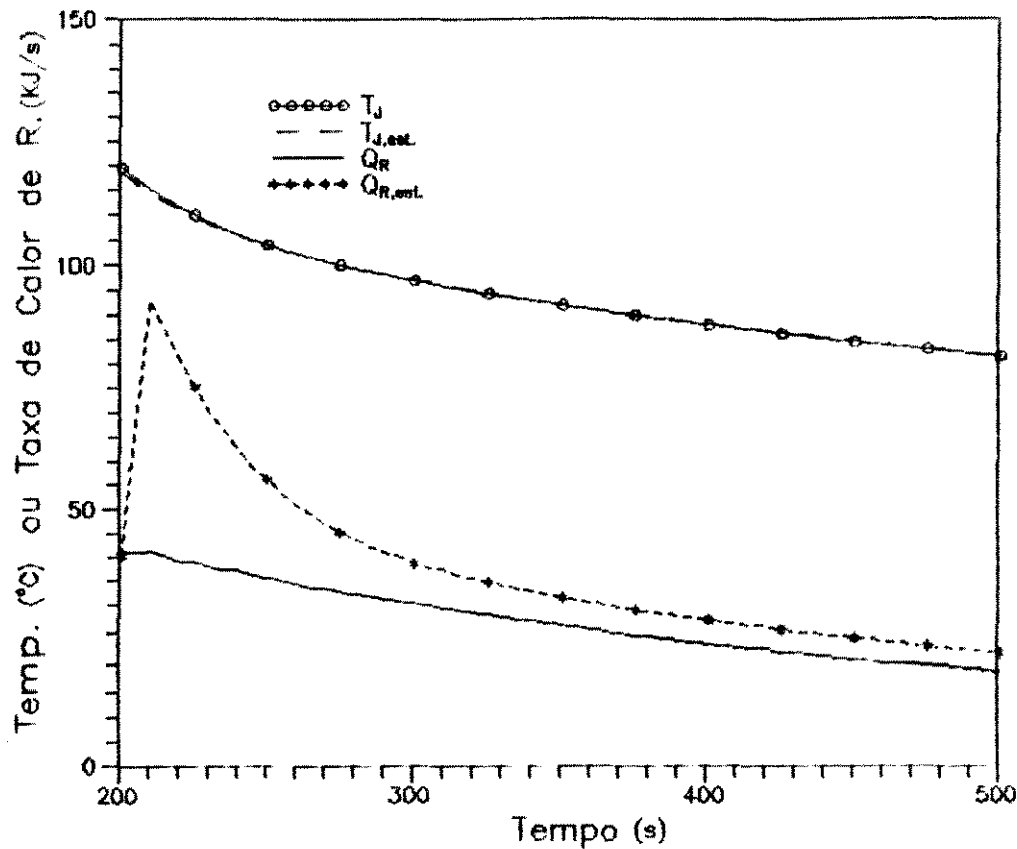


FIGURA 5.10.2 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associadas ao comportamento do reator dado na Figura 5.10.1.

necessário, para que isto ocorresse, que a ação de controle fosse bastante intensa.

A oscilação observada na vazão do fluido refrigerante, variável manipulada do processo na etapa de resfriamento, é um fenômeno que deve ser evitado, em benefício da vida útil da válvula que regula a sua vazão.

Bristol [25] atesta que, para os casos em que o intervalo de controle for maior ou igual a duas vezes a constante de tempo integral do controlador linear (ou seja $\Delta \geq 2\tau_I$), a equação simplificada da forma posição do controlador linear PID:

$$u_m = K_c \left\{ e_m + \frac{\Delta}{\tau_I} \sum_{i=1}^m e_i + \frac{\tau_D}{\Delta} (e_m - e_{m-1}) \right\} \quad (5.20)$$

torna-se instável, e incorreta quando τ_I e Δ são aproximadamente iguais. Como recomenda este mesmo autor, em tais casos o valor de τ_I deve ser substituído por $(\tau_I + \Delta)$ para que o comportamento do controlador linear seja normalizado.

Na simulação que aparece representada na Figura 5.10.1, bem como em todas as simulações aqui realizadas, o intervalo de controle é de 5 s. Para esta mesma simulação a constante de tempo integral τ_{I2} é igual a 2 s. Este valor de τ_I , embora tenha minimizado o IAE da malha GLC na etapa de resfriamento do reator, gera a instabilidade a que se refere Bristol, e provavelmente resultando na oscilação da variável manipulada do processo (F_c) observada (Figura 5.10.1). Ao serem realizadas simulações com valores de τ_{I2} cada vez maiores que 2 s (mantendo-se os parâmetros do processo e o ganho do controlador linear inalterados) as variações de F_c tornam-se sistematicamente mais suaves ao longo da operação do reator. Como exemplo desta tendência pode ser mostrada a Figura 5.11.1 e 5.11.2, onde aparece o resultado do comportamento da malha de controle quando o valor de τ_{I2} é elevado para 7 s.

Em todas as simulações até aqui realizadas o ganho do controlador linear foi mantido fixo para cada uma das malhas GLC (definidas pelos 4 diferentes conjuntos de parâmetros de cada etapa), sendo seu valor determinado pela S.D.. Para a simulação representada na Figura 5.11.1 observa-se que nos primeiros

instantes da etapa de resfriamento a vazão do refrigerante aumenta bruscamente, resfriando o meio reacional mais do que o necessário. Este fato pode sugerir que o ganho do controlador linear admitido na malha de controle neste caso seja maior do que deveria ser. Na Figura 5.12 tem-se investigada a influência do valor de K_{c2} sobre a resposta da malha GLC da etapa de resfriamento sendo a dinâmica do processo e valor de τ_{12} os mesmos definidos para os resultados da Figura 5.11.1.

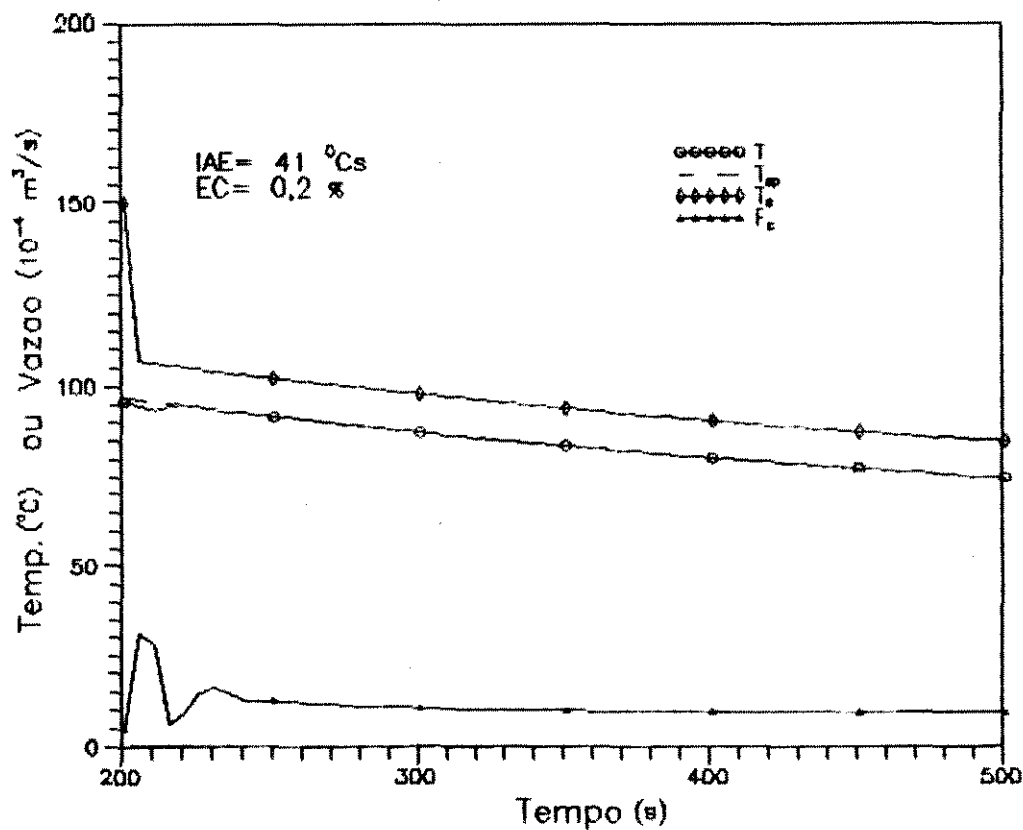


FIGURA 5.11.1 - Comportamento do reator na etapa de resfriamento com as mesmas condições de processo e K_{c2} considerado na Figura 5.10.1, sendo que agora $\tau_{12} = 7 \text{ s}$.

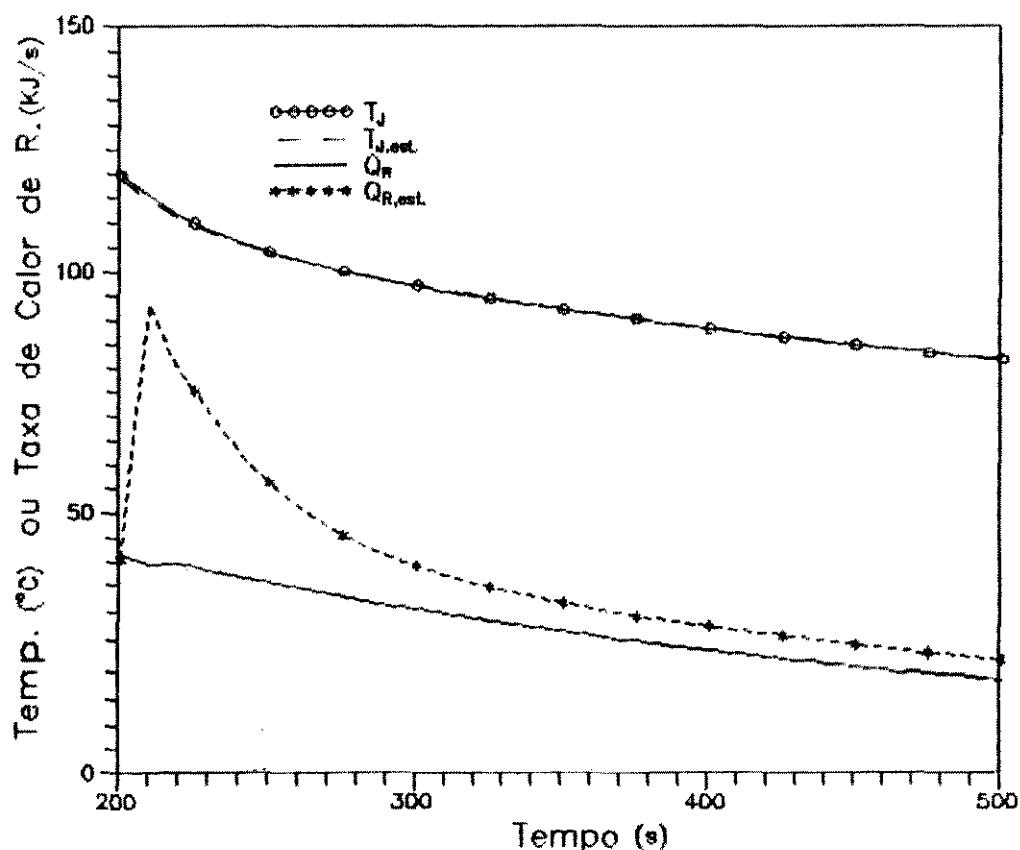


FIGURA 5.11.2 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associadas ao comportamento do reator dado na Figura 5.11.1.

Pela Figura 5.12 vê-se que a resposta da malha GLC pode fornecer uma resposta do processo ainda melhor em relação a que aparece na figura 5.11.1, do ponto de vista de um menor esforço de controle (sem que com isso o IAE seja aumentado), no caso de K_{c2} ser igual a 0,3 (que, ao contrário do esperado, é maior do que aquele adotado na simulação da Figura 5.11.1). A resposta do processo associada a esta nova sintonização é dada na Figura 5.13.1 e 5.13.2.

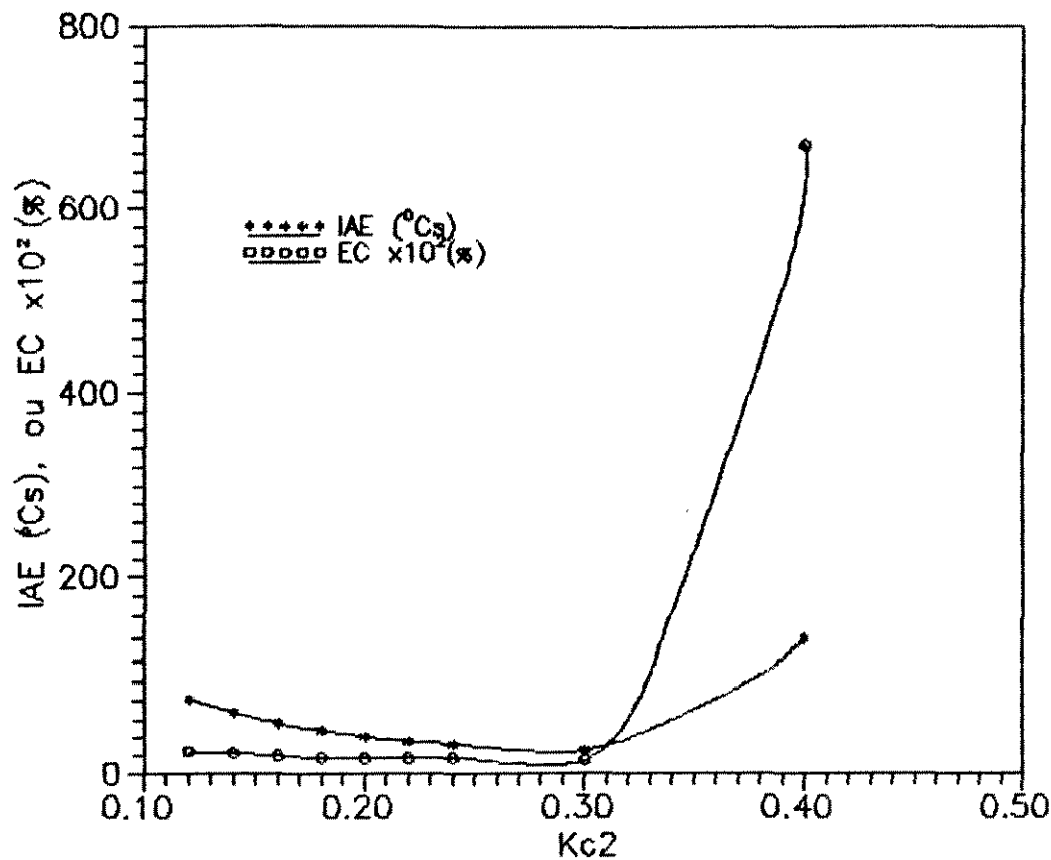


FIGURA 5.12 - Evolução de IAE e EC na resposta da malha GLC, na etapa de resfriamento do reator, em função de K_{c2} . A dinâmica do processo é dada pelo conjunto I de β ($K_{p2} = 100$, e $\tau_{p2} = 100$ s), e $\tau_{I2} = 7$ s.

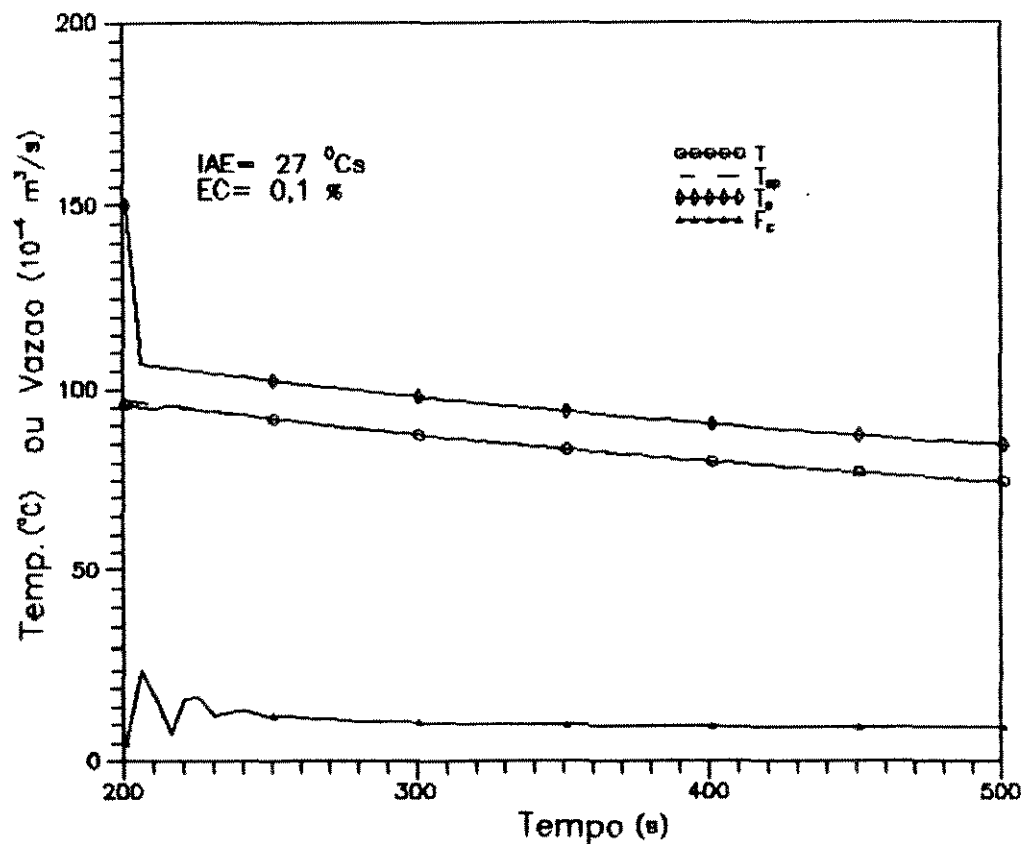


FIGURA 5.13.1 - Comportamento do reator na etapa de resfriamento com as condições de processo e τ_{I2} (7 s) consideradas na Figura 5.11.1, para um valor de $K_{c2} = 0,3$.

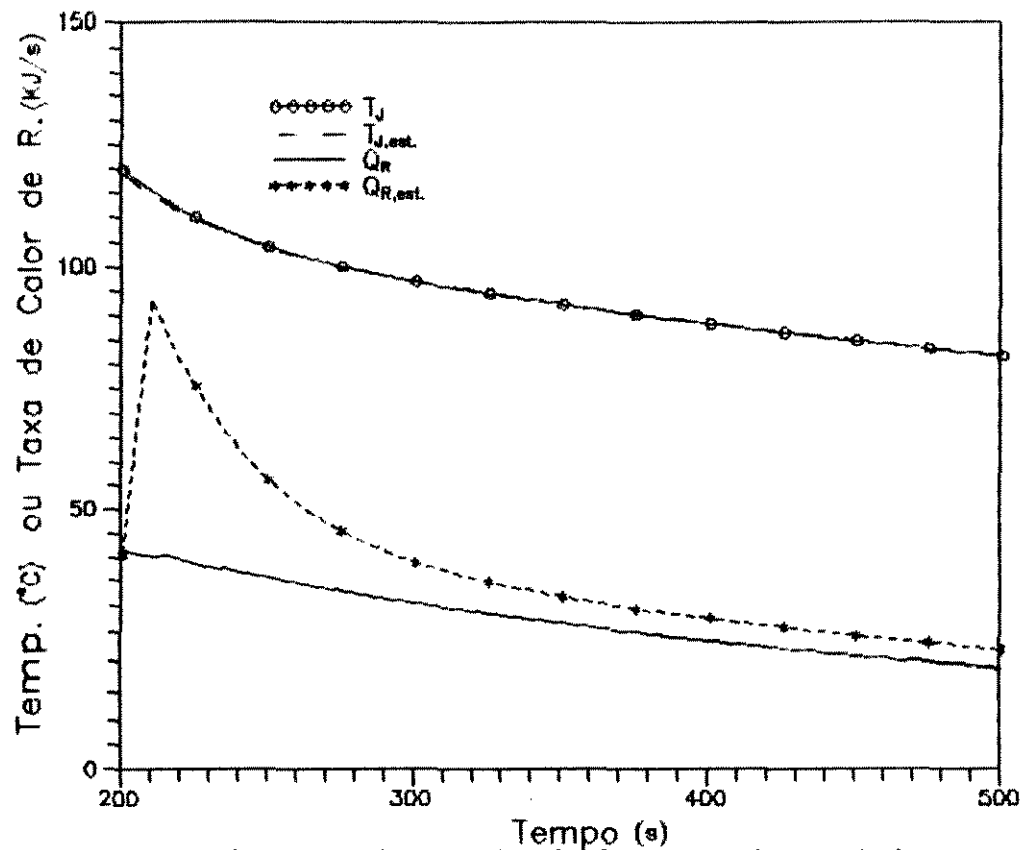


FIGURA 5.13.2 - Evolução real e estimada de Q_r e T_j associadas ao comportamento do reator dado na Figura 5.13.1.

5.4.3 - CONTROLE ÓTIMO DA TEMPERATURA DO REATOR PARA TODA A OPERAÇÃO DE BATELADA

Para etapa de aquecimento do reator a malha GLC que apresentou resposta mais satisfatória, em termos de valor mínimo de IAE, foi representada pela Figura 5.5.1, sendo os parâmetros de processo e do controlador linear dados na Tabela 5.7.

Na etapa de resfriamento do reator a resposta da malha GLC para a qual o IAE foi mínimo teve o inconveniente de provocar oscilação na trajetória da variável manipulada, e foi vista na

Figura 5.10.1. Em casos como este a melhor resposta da malha não deve ser analisada apenas em termos de valor de IAE, mas também em relação ao esforço de controle necessário para alcançar a melhor performance. Uma resposta que combine um valor de IAE ligeiramente superior em relação aos resposta dada na Figura 5.10.1, porém com menor esforço de controle, foi conseguida com τ_{12} de 7 s, e K_{c2} igual a 0,3.. A resposta do processo para estas condições é vista na Figura 5.13.1.

O controle do reator em batelada considerado neste trabalho é feito de modo bastante satisfatório quando, para as etapas de aquecimento e resfriamento, as malhas GLC tiverem os respectivos parâmetros de processo e controlador linear descritos na tabela 5.7. A simulação de toda a operação do reator resultante da combinação da resposta destas duas malhas é esquematizada nas Figuras 5.14.1 e 5.14.2.

TABELA 5.7 - Descrição dos parâmetros do processo e do controlador linear, das as malhas que conduzem a melhor resposta nas duas etapas de operação do reator. Obs.:1) $\tau_p = \tau_I = \tau_D = s$; $[IAE] = Cs$; $[EC] = \%$. 2) A etapa de aquecimento dura os 200 s iniciais, e a de resfriamento vai deste instante até o final da operação.

ETAPA DE OPER.	$K_p ; \tau_p ; \zeta$	$K_c ; \tau_I ; \tau_D$	IAE; EC
Aquecimento	100; 60; 1,5	0,36; 20; 10	169; 7,6
Resfriamento	100; 100; —	0,3 ; 7; —	27; 0,1

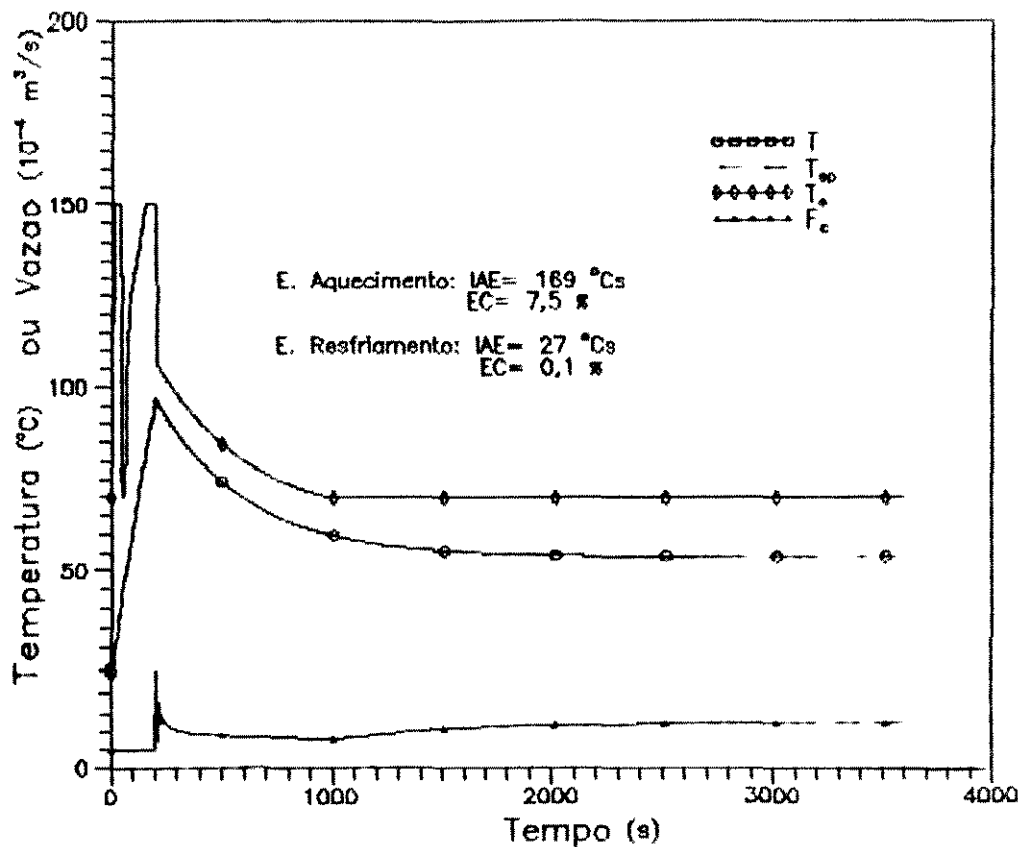


FIGURA 5.14.1- Comportamento ótimo, em termos de valor mínimo de IAE para o menor EC possível, do reator, para toda a operação em batelada.

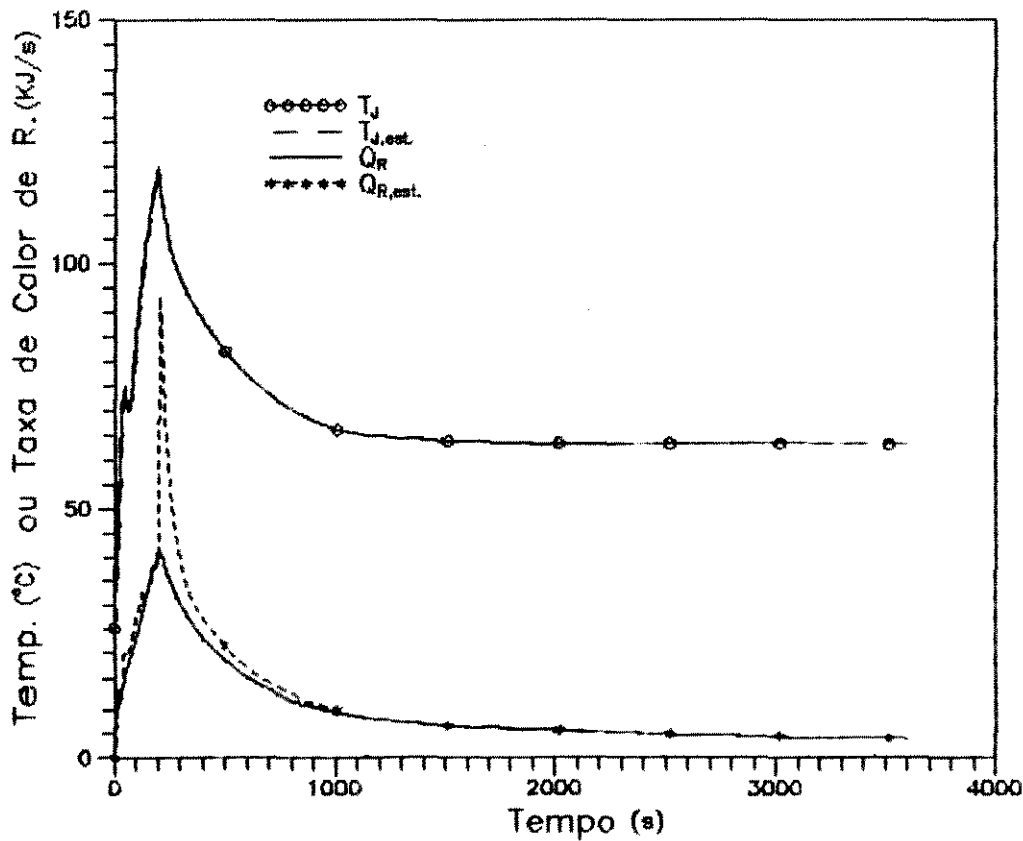


FIGURA 5.14.2 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associadas ao comportamento do reator dado na Figura 5.14.1.

5.4.3.1 - CONTROLE ÓTIMO DA TEMPERATURA DO REATOR PARA TODA A OPERAÇÃO DE BATELADA, PARA UMA CONCENTRAÇÃO INICIAL DO REAGENTE A DE 4 Kg/mol/m^3

Fazendo-se a concentração inicial do reagente A não mais igual a 1 Kg/mol/m^3 , como foi admitido até agora em todas as simulações anteriores, e considerando-a como sendo de 4 Kg/mol/m^3 (com os demais parâmetros de operação do processo, β 's, e do controlador linear os mesmos considerados nos resultados da Figura 5.14.1) obtém-se o comportamento do reator igual ao que é dado nas Figuras 5.15.1 a 5.15.3.

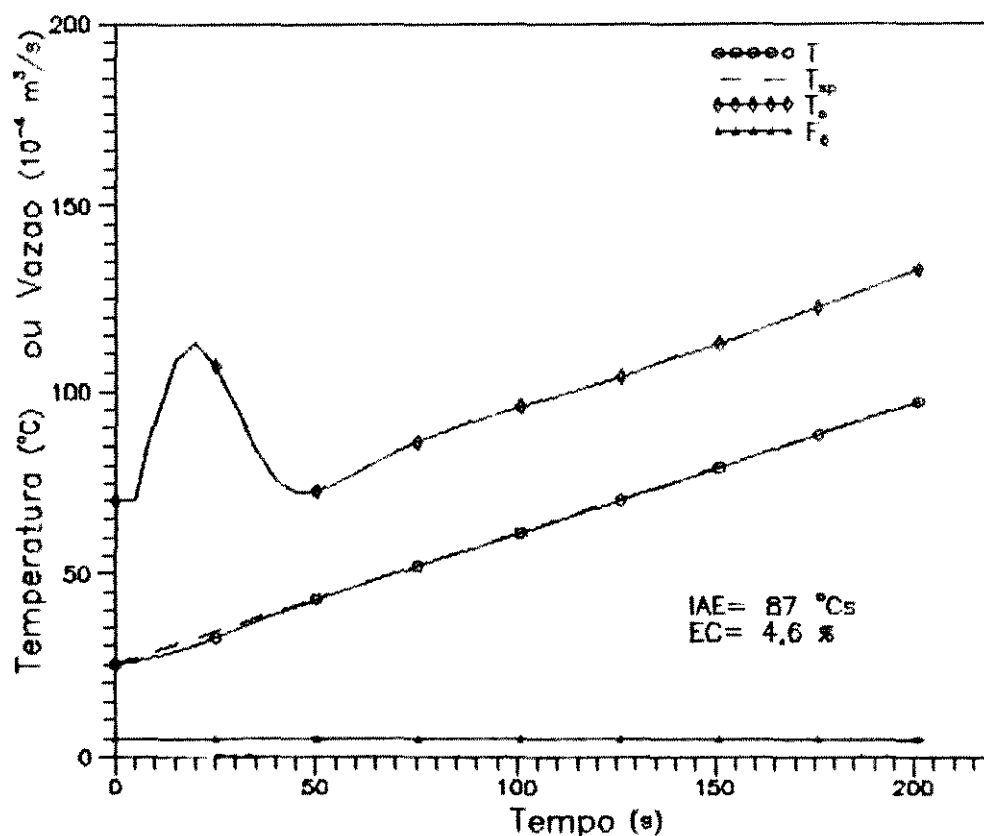


FIGURA 5.15.1 - Comportamento do reator na etapa de aquecimento, com a mesma dinâmica, e sintonização do controlador linear consideradas na Figura 5.5.1, sendo para este caso $C_{A,0} = 4 \text{ Kg/mol/m}^3$.

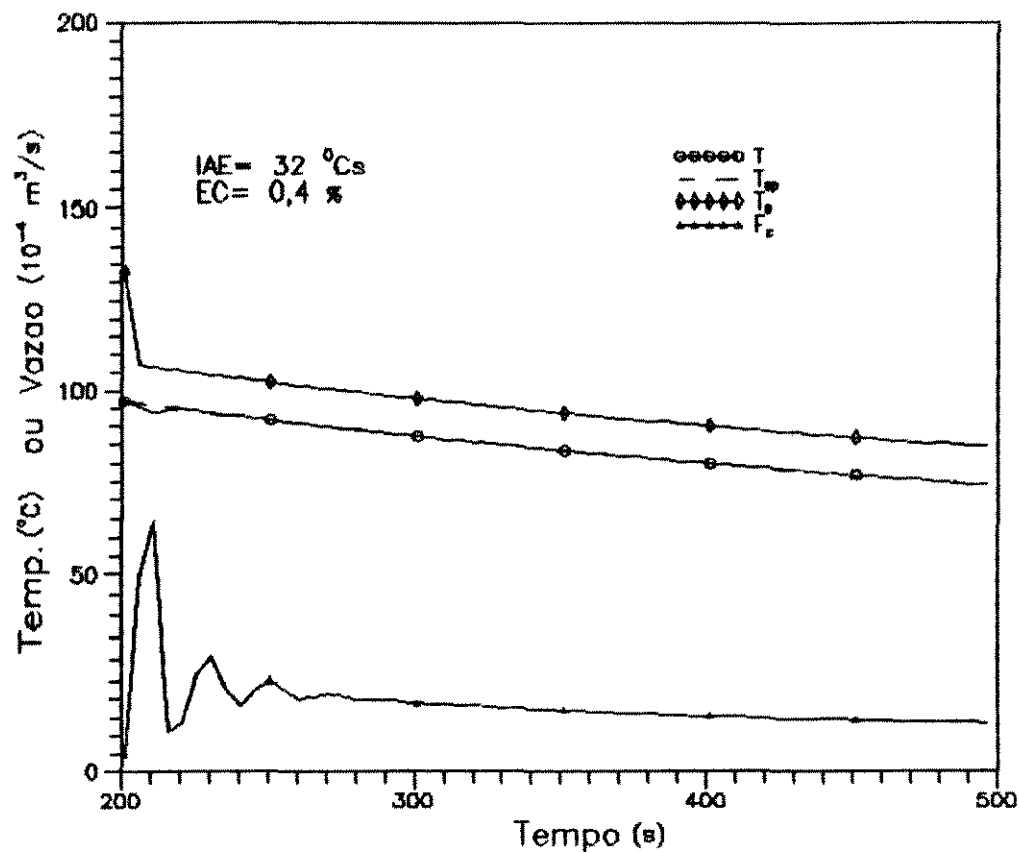


FIGURA 5.15.2 - Comportamento do reator no início da etapa de resfriamento, com a mesma dinâmica, e sintonização do controlador linear consideradas na Figura 5.13.1, sendo que aqui $C_{A,0} = 4 \text{ Kg/mol/m}^3$.

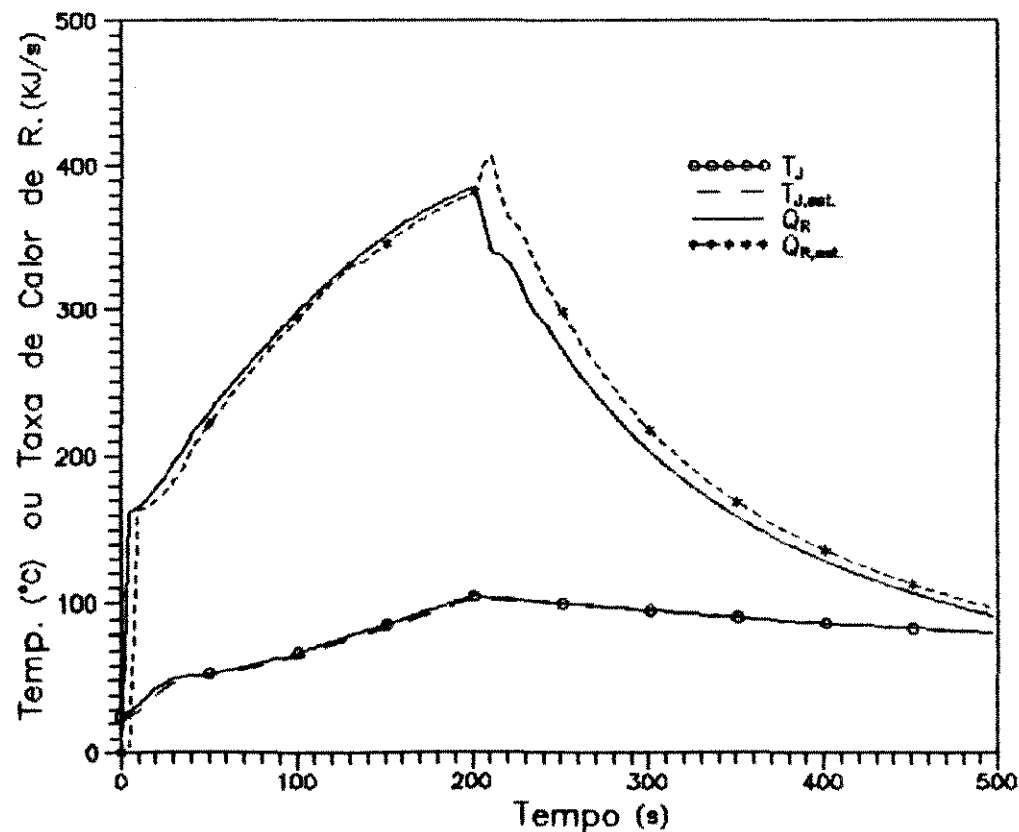


FIGURA 5.15.3 - Evolução real e estimada de Q_R e T_j associadas ao comportamento do reator dado nas Figuras 5.15.1 e 5.15.2.

Ao serem comparadas as Figuras 5.5.1 e 5.15.1 pode-se observar que a trajetória da temperatura do meio reacional, na etapa de aquecimento, torna-se mais próxima daquela desejada quando a concentração inicial do reagente A é aumentada de 1 para 4 Kgmol/m³. Isto se confirma por um menor valor de IAE (87 °Cs) obtido na resposta da malha de controle quando C_{Ao} é igual a 4 Kgmol/m³ (Figura 5.15.1).

A diminuição do valor de IAE da resposta da malha na etapa de aquecimento do reator, em função do aumento de C_{Ao} , é consequência direta do aumento da taxa de calor gerado pela reação. Esta elevação de Q_r possibilita um aquecimento mais próximo do desejado nos instantes iniciais e finais desta mesma etapa. Para as simulações em que C_{Ao} foi igual a 1 Kgmol/m³, ainda que a temperatura do vapor estivesse em seu valor máximo, a taxa de elevação de temperatura do meio reacional não pode acompanhar aquela desejada na partida, ou final da etapa de aquecimento do reator, mesmo com a melhor sintonização do controlador linear.

CAPÍTULO 6 - DISCUSSÃO DOS RESULTADOS E CONCLUSÃO

Todas as simulações realizadas neste trabalho, nas quais o comportamento do reator em batelada exotérmico estudado era controlado pela estratégia GLC, foram conduzidas usando-se um período de amostragem de 5 segundos. Na pré-sintonização do controlador linear da malha GLC pelo método da S.D. foi ignorada a dinâmica associada a presença do mostrador combinado com o "data-hold" (que define uma malha de controle digital).

Analisados, os dados das Tabelas 5.2 (etapa de aquecimento) e 5.5 (etapa de resfriamento) mostraram uma tendência de elevação do IAE na resposta da malha de controle GLC a medida em que a constante de tempo do processo foi feita sistematicamente menor (conjunto I ao IV de parâmetros β) quando o controlador linear estava sintonizado pelo método da S.D.. A explicação para este fato é simples. A dinâmica associada ao conjunto mostrador/"data-hold" de ordem zero é aproximadamente igual a de um tempo morto de metade do intervalo de amostragem da malha de controle [26,27]. Assim, ignorá-la na hora do projeto do controlador linear da malha de controle é uma consideração menos precisa a medida em que o valor de τ_p é diminuído, para um mesmo Δ .

O procedimento adotado visando a obtenção dos parâmetros ótimos do controlador linear da malha GLC mostrou que a intensidade da ação integral do mesmo afetava intensamente o desempenho da malha de controle GLC. Ao serem confrontados os

parâmetros do controlador linear inicialmente obtidos pela S.D. com aqueles que minimizam o IAE, para as 4 malhas de controle associadas aos diferentes conjuntos de β (Tabelas 5.2 e 5.3, para a etapa de aquecimento, ou 5.5 e 5.6, para a etapa de resfriamento do reator), vê-se que a intensidade da ação integral afeta significativamente o seu desempenho. Em todos estes casos a melhora do desempenho da malha GLC foi conseguida com a diminuição do valor de τ_I em relação aquele pré-determinado pela S.D.. Uma outra forma de ser intensificada a ação integral é conseguida pelo aumento do ganho do controlador linear. Como mostraram as equações (5.7) e (5.11), para as etapas de aquecimento e resfriamento do reator, respectivamente, o estudo da influência do valor do ganho do controlador linear no desempenho da malha de controle GLC significa, em outras palavras, uma análise da influência da constante de tempo em malha fechada sobre a qualidade daquela resposta. Isto sugere um procedimento alternativo ao que aqui foi seguido para minimizar o valor do IAE da resposta das malhas de controle. Este consistiria em, mantendo fixos os valores de τ_I e τ_D (definidos pela S.D.), variar o valor de K_C e se acompanhar a evolução do valor do IAE resultante da resposta da malha.

Pelos resultados da Tabela 5.3 e 5.6, quando o controlador linear da malha estava sintonizado de forma ótima, para a etapa de aquecimento e de resfriamento, respectivamente, observou-se a mesma tendência de diminuição do IAE com o aumento da constante de tempo do processo, verificada para a sintonização feita pela

S.D.). Com isto conclui-se que, embora o método de controle GLC permita a escolha dos parâmetros do processo, pela possibilidade da definição dos parâmetros β , mostra-se conveniente, quando empregada esta estratégia de controle, que a opção recaia sobre uma condição em que a constante de tempo do processo seja elevada. Esta constatação coincide com o procedimento seguido (porém não justificado) por Kravaris e Chung [10], já em seu trabalho, quando apresentavam a estratégia GLC, e aplicavam-na a um exemplo. A constante de tempo do processo por eles escolhida naquela ocasião foi de 3600 segundos.

A estratégia de controle GLC mostrou-se capaz de controlar de modo bastante satisfatório o exemplo de processo estudado neste trabalho, como mostraram os resultados obtidos. Para as condições de processo e sintonização de controladores lineares definidas na Tabela 5.7 foi possível atingir uma qualidade de controle do reator semelhante ao apresentado na Figura 5.14.1 para todo o período de batelada. Nesta Figura, dada a reduzida diferença entre a trajetória real e a desejada para a temperatura do meio reacional, ocorre praticamente a superposição destas duas curvas.

É indiscutível que o desempenho alcançado no resultado final na simulação do controle do reator em batelada exotérmico pela estratégia GLC foi bastante satisfatório. A capacidade de controlar o reator estudado dispondo-se apenas do valor da temperatura do meio reacional a cada instante de ação de controle, sendo todas as informações da cinética de reação do processo disponíveis apenas pela estimativa da taxa do calor de reação, é

um importante indicativo de que a estratégia de controle GLC deve sempre ser lembrada quando se tiver por objetivo controlar um processo químico acentuadamente não-linear e que não opere em torno de algum estado de referência.

Apesar da qualidade do controle conseguida para o processo estudado neste trabalho, e das já ressaltadas conveniências da utilização de estratégia de controle GLC, alguns pontos merecem atenção quando se fizer a opção por esta estratégia de controle. A escolha dos parâmetros do processo linearizado, embora seja livre, pode influenciar bastante no desempenho da malha de controle (como observado para a constante de tempo do processo). A explicação para isto, contudo, não foi encontrada aqui. A sintonização do controlador linear da malha de controle GLC, pelo que se viu neste trabalho, deve ser encarada como uma etapa pouco simples, ao menos quando sua configuração é do tipo P, PI ou PID.

Dada a conveniência do uso da estratégia de controle GLC ao tipo de processo que por ela pode ser controlado (processos não-lineares e sem um estado estacionário de operação), devem aqui ser deixadas como sugestões, para estudos futuros, àqueles interessados, uma investigação profunda da influência dos parâmetros do processo linearizado no desempenho da malha de controle GLC, bem como a aplicação de técnicas de controle digital para a sintonização do controlador linear da malha.

ANEXO

Na aplicação do método GLC a um problema de controle de tem-se a a necessidade do cálculo de algumas derivadas de Lie envolvendo funções escalares e vetorias definidas pelo modelo do processo.

O emprego do operador "derivada de Lie (L)" é bastante simples, como pode ser visto a seguir.

Sejam as funções vetoriais $f(x)$ e $g(x)$:

$$f(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix} \quad g(x) = \begin{bmatrix} g_1(x) \\ \vdots \\ g_n(x) \end{bmatrix}$$

e a função escalar $h(x)$. Desta maneira, tem-se que a derivada de Lie de primeira ordem da função escalar $h(x)$ em relação a função vetorial $f(x)$ é dada por:

$$L_{f(x)} h(x) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial h(x)}{\partial x_i} f_i(x) \quad (A.1)$$

Como pode-se ver a derivada de Lie é uma derivada direcional de uma função escalar em relação a uma função vetorial.

O operador derivada de Lie é um operador diferencial parcial, de 1^ª ordem, definido por:

$$L_f = \sum_{i=1}^n f_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (A.2)$$

O uso repetido do operador "derivada de Lie" é possível. Por exemplo, pode-se desejar calcular a derivada de Lie do escalar $h(x)$ primeiro na direção do vetor $f(x)$ e então na direção do vetor $g(x)$:

$$L_g L_f h(x) = \sum_{j=1}^n g_j(x) \frac{\partial (L_f h(x))}{\partial x_j} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n \left[g_j(x) f_i(x) \frac{\partial^2 h(x)}{\partial x_i \partial x_j} + g_j(x) \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \frac{\partial h(x)}{\partial x_i} \right] \quad (A.3)$$

A composição dos operadores derivada de Lie L_f e L_g é um operador diferencial parcial linear, de 2^ª ordem dado por:

$$L_g L_f = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n \left[g_j(x) f_i(x) \frac{\partial^2 h(x)}{\partial x_i \partial x_j} + g_j(x) \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \frac{\partial h(x)}{\partial x_i} \right] \quad (A.4)$$

No caso do uso repetido do operador derivada de Lie em relação ao mesmo vetor-argumento, é comum a seguinte notação:

$$L_f^2 = L_f L_f \quad (A.5)$$

$$L_f^3 = L_f L_f^2 \quad (A.6)$$

$$L_f^k = L_f L_f^{k-1} \quad (A.7)$$

NOMENCLATURA

a	constante do método Runge-Kutta-Gill
A_j	área de troca térmica entre a parede da camisa de vapor e o meio reacional, m^2
A_{jo}	área de troca térmica entre o vapor e a parede da camisa de vapor, m^2
A_c	área de troca térmica entre o fluido refrigerante e o meio reacional, m^2
A_{10}	fator de frequência da reação de consumo do reagente A, $m^3.Kmol^{-1}.s^{-1}$
A_{20}	fator de frequência da reação de consumo do reagente B, s^{-1}
a	constante do método Runge-Kutta-Gill
b	constante do método Runge-Kutta-Gill
c	constante do método Runge-Kutta-Gill
C_A	concentração do componente A, $Kmol.m^{-3}$
C_B	concentração do componente B, $Kmol.m^{-3}$
C_p	capacidade calorífica do meio reacional, $KJ.Kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$
Cp_j	capacidade calorífica da parede da camisa de vapor, $KJ.Kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$
Cp_c	capacidade calorífica do fluido refrigerante, $KJ.Kg^{-1}.^{\circ}C^{-1}$
d	constante do método Runge-Kutta-Gill
E	energia de ativação da reação, $KJ.Kmol^{-1}.K^{-1}$
EC	esforço de controle, %
$f(x)$	função vetorial das variáveis de estado do processo
F_c	vazão do fluido refrigerante, $m^3.s^{-1}$

$g(x)$	função vetorial das variáveis de estado do processo
G_p	função de transferência do processo
G_c	função de transferência do controlador linear
G_{CL}	função de transferência da malha fechada
$h(x)$	função escalar das variáveis de estado do processo
h	passo de integração
IAE	integral do valor absoluto do erro, $^{\circ}\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$
h_{jo}	coeficiente de transferência de calor entre o vapor e a parede da camisa, $\text{KJ} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
h_j	coeficiente de transferência de calor entre a parede da camisa de vapor e a massa reacional, $\text{KJ} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
k_1	constante de taxa de reação de consumo do reagente A, $\text{m}^3 \cdot \text{Kmol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
k_2	constante de taxa de reação de consumo do reagente B, s^{-1}
K_{p1}	ganho do processo na etapa de aquecimento
K_{p2}	ganho do processo na etapa de resfriamento
K_{c1}	ganho do controlador linear da etapa de aquecimento
K_{c2}	ganho do controlador linear da etapa de resfriamento
$lmtd$	média logarítmica da diferença de temperatura entre o fluido refrigerante e o meio reacional na entrada e na saída da serpentina, $^{\circ}\text{C}$
M_j	massa da parede da camisa de vapor, Kg
$p(x)$	função escalar das variáveis de estado do processo
$q(x)$	função escalar das variáveis de estado do processo
Q_{aq}	taxa de calor fornecido ao meio reacional pela parede da camisa de vapor, $\text{KJ} \cdot \text{s}^{-1}$

Q_r	taxa de calor gerado pela reação, KJ.s^{-1}
Q_{res}	taxa de calor retirado do meio reacional pela serpentina, KJ.s^{-1}
Q_v	taxa de calor cedido pelo vapor à parede da camisa, KJ.s^{-1}
r	ordem relativa do processo não-linear
r_1	taxa de reação de consumo do reagente A, Kmol.s^{-1}
r_2	taxa de reação de consumo do reagente B, Kmol.s^{-1}
R	constante universal dos gases, $\text{KJ.Kmol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
t	tempo, s
T	temperatura do meio reacional, $^{\circ}\text{C}$
T_s	temperatura do vapor, $^{\circ}\text{C}$
T_c	temperatura do fluido refrigerante no interior da serpentina, $^{\circ}\text{C}$
T_j	temperatura da parede da camisa de vapor, $^{\circ}\text{C}$
T_d	temperatura desejada do meio reacional, $^{\circ}\text{C}$
T_{sp}	temperatura do "setpoint", $^{\circ}\text{C}$
u	variável manipulada do processo
U_c	coeficiente global de transferência de calor entre o fluido refrigerante e o meio reacional, $\text{KJ.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
U_j	coeficiente global de transferência de calor entre o vapor e a massa reacional, $\text{KJ.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
v_1	variável manipulada fictícia na etapa de aquecimento do reator
v_2	variável manipulada fictícia na etapa de resfriamento do reator
V	volume do meio reacional

x	vetor das variáveis de estado do processo
y	variável controlada do processo

Letras Gregas

∂	derivada parcial
$\phi[x(t_f)]$	função escalar das variáveis de estado do processo no instante final de operação
$\psi(x,v)$	função escalar das variáveis de estado do processo e da variável manipulada fictícia v
β	parâmetro que define a dinâmica do processo linearizado pelo método GLC
$\beta_{k,1}$	k -ésimo parâmetro que define a dinâmica do processo linearizado na etapa de aquecimento
$\beta_{k,2}$	k -ésimo parâmetro que define a dinâmica do processo linearizado na etapa de resfriamento
ΔH_1	calor de reação molar de consumo do reagente A, KJ.Kmol^{-1}
ΔH_2	calor de reação molar de consumo do reagente B, KJ.Kmol^{-1}
ρ	densidade do meio reacional, Kg.m^{-3}
ρ_c	densidade do fluido refrigerante, Kg.m^{-3}
τ_{p1}	constante de tempo do processo na etapa de aquecimento, s
τ_{p2}	constante de tempo do processo na etapa de resfriamento, s
τ_{I1}	constante de tempo integral do controlador linear da etapa de aquecimento, s

τ_{I2}	constante de tempo integral do controlador linear da etapa de resfriamento, s
τ_{D1}	constante de tempo derivativa do controlador linear da etapa de aquecimento, s
τ_{D2}	constante de tempo derivativa do controlador linear da etapa de resfriamento, s
τ_{CL}	constante de tempo da malha fechada, s
ζ_1	fator de amortecimento do processo na etapa de aquecimento

Sobrescrito

$\hat{}$	valor estimado
$\dot{}$	derivada em relação ao tempo

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

-
- [1] - Anderson, E.
"Specialty Chemicals Mixed Bag for Growth"
Chem. Eng. News, June 4, 20 (1984).
- [2] - Metha, G.A.
"The Benefits of Batch Process Control"
Chem. Eng. Prog., 79, (10), October, (1982).
- [3] - Shaw, W.T.
"Structured Design Produces Good Batch Control Programs"
Control Eng., 30 (12), 72-76.
- [4] - Jutan, A., and Uppal, A.
"Combined Feedforward-Feedback Servo Control Scheme for an
Exothermic Batch Reactor"
Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 23, 597 (1984).
- [5] - Filho, J.C.C.
Tese de Mestrado
Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Eng. Química,
(1992).
- [6] - Marroquin, G., Luyben, W.L.
"Experimental Evaluation of nonlinear Cascade Control for
Batch Reactors"
Ind. Engng. Chem. Fundam., 11, 552-556 (1972).
- [7] - Marroquin, G., Luyben, W.L.
"Practical Control Studies of Batch Reactors Using
Realist Mathematical Models"
Chem. Engng. Sci., 28, 993-1003 (1973).

-
- [8] - Clarck, D.W. and Gawthroup, P.J.
"Implementation and Application of Microprocessor-Based Self-Tuners"
Automatica, 17, 233-244 (1981).
- [9] - Kiparissides, C. and Shah, S.L.
"Self-Tuning and Stable Adaptative Control of a Batch Polymerization Reactor"
Automatica, 19, 225-235 (1983).
- [10] - Kravaris, C., and Chung, C.B.
"Nonlinear Feedback Synthesis by Global Input/Output Linearization"
A.I.Ch.E. Journal, 33, 592, April, (1987).
- [11] - Hirschorn, R.M.
"Invertibility of Nonlinear Control Systems"
S.I.A.M.J. Control Optim., 17, 289, (1979).
- [12] - Byrnes, C.I., and Isidori, A.
"Global Feedback Stabilization of Nonlinear Systems"
Proceedings of the 24th. IEEE CDC, December 1985, Ft. Lauderdale, FL; pp 1031-1037.
- [13] - Kou, S.R., Elliott, D.L., and Tarn, T.J.
"Exponential Observers for Nonlinear Dynamic Systems"
Inform. Control, 29, 204, (1975).
- [14] - Banks, S.P.
"A Note on Nonlinear Observers"
Int. J. Control, 34, 185, (1981).
-

-
- [15] - Krener, A.J., and Isidori, A.
"Linearization by Output Injection and Nonlinear Observers"
Syst.Control Lett., 3, 47, (1983).
- [16] - Bestle, D., and Zeitz, M.
"Canonical Form Observers Design for Nonlinear Time-
variable Systems"
Int.J.Control, 38, 419, (1983).
- [17] - Ray, W.H., and Szekely, J.
Process Optimization, Wiley, New York, (1973).
- [18] - Daoutidis, P., and Kravaris, C.
"Synthesis of Feedforward/State Feedback Controllers for
Nonlinear Process"
A.I.Ch.E. Journal, 35, 1602, (1989a).
- [19] - Daoutidis, P., and Kravaris, C.
"Feedforward/State Feedback Control of Nonlinear
Process"
Proc.A.C.C., 1082, Pittsburg, (1989a).
- [20] - Kravaris, C., and Soroush, M.
"Synthesis of Multivariable Nonlinear Control by Input/
Output Linearization"
A.I.Ch.E. Journal, 36, 294, (1990).
- [21] - Kravaris, C., Wright, R.A.
"Deadtime Compensation for Nonlinear Process"
A.I.Ch.E. Journal, 35, 1535, (1989).

-
- [22] - Coulson, J.M., and Richardson, J.F.
Chemical Engineering, 3rd. ed. Pergamon
Elmsford, NY (1977).
- [23] - Seborg, D., Edgar, T., e Mellichamp, D.A.
Process Dynamics Control
Wiley, N.Y..
- [24] - Ziegler, J.G., e Nichols, N.B.
"Optimum Settings for Automatic Controllers"
Trans. A.S.M.E., 64, 759, (1942)
- [25] - Bristol, E.H.
"Designing and Programming Control Algorithms for DDC
Systems"
Cont. Eng., 24, (1977)
- [26] - Mellichamp, D.A., Coughanowr, R.D., e Koppel
"Identification and Adaptation in Control Loops with
Time-Varying Gain"
A.I.Ch.E. Journal, 12(1), 83, (1986)
- [27] - Smith, C.L.
Digital Computer Process Control, International Textbook
Scranton, PA, (1972)